

# **Numerische Simulation turbulenter vorgemischter Verbrennungssysteme: Entwicklung und Anwendung eines RANS-basierten Gesamtmodells**

Vom Fachbereich Maschinenbau  
an der Technischen Universität Darmstadt  
zur  
Erlangung des Grades eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)  
genehmigte

D i s s e r t a t i o n

vorgelegt von

**Dipl.-Ing. Elena Schneider**

aus Wladiwostok (Russische Föderation)

Berichterstatter:	Prof. Dr.-Ing. J. Janicka
Mitberichterstatter:	Prof. Dr.-Ing. M. Oberlack
Tag der Einreichung:	28. Februar 2005
Tag der mündlichen Prüfung:	17. Mai 2005

Darmstadt 2005

**D 17**

## **Vorwort**

Diese Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftliche Mitarbeiterin am Fachgebiet Energie- und Kraftwerkstechnik der Technischen Universität Darmstadt.

Bei dem Leiter des Fachgebietes, Herrn Professor Dr.-Ing. J. Janicka, möchte ich mich herzlich bedanken. Er hat mir die Gelegenheit zur Promotion gegeben und hat durch sein Interesse und motivierendes Wesen zum erfolgreichen Abschluss dieser Arbeit beigetragen.

Bei Herrn Professor Dr.-Ing. M. Oberlack bedanke ich mich für sein entgegengebrachtes Interesse und die Übernahme des Koreferats.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Dr. rer. nat. habil. A. Sadiki für die fruchtbaren Diskussionen und fachlichen Ratschläge, für die sorgfältige Durchsicht des Manuskripts und viele wertvolle Beiträge.

Für das angenehme Arbeitsklima, die freundliche Atmosphäre im Fachgebiet und Hilfsbereitschaft sei allen Kollegen gedankt. Für die fruchtbaren Diskussionen, wertvollen Hinweise, Anregungen und Unterstützung geht mein herzlicher Dank an Alexander Maltsev, Michael Düsing, Stefan Repp, Bernhardt Wegner, Markus Klein und Martin Freitag.

Vor allem danke ich meinen Mann Christoph für seine aufmunternde Unterstützung und Hilfe bei der Erstellung dieser Arbeit.

Ich bedanke mich ganz herzlich bei meiner Schwiegermutter Marliese und bei meiner Freundin Galina Yun für die Unterstützung zu Hause.

Meinen Eltern sei besonders gedankt für die moralische Unterstützung während der Promotion und dass sie mir den eingeschlagenen Lebensweg durch ihre Begleitung und wohl so manche Mühe erst ermöglicht haben.

Elena Schneider

Darmstadt, 28. Februar 2005

# Inhaltverzeichnis

<b>Nomenklatur</b>	<b>IV</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1 Motivation	1
1.2 Stand der Forschung	2
1.3 Zielsetzung und Struktur der Arbeit	3
<b>2 Theoretische Grundlagen: Turbulenz</b>	<b>5</b>
2.1 Eigenschaften der turbulenten Strömungen	5
2.2 Turbulente Skalen	5
2.3 Bilanzgleichungen	7
2.4 Modellierung turbulenter Strömungen	9
2.4.1 DNS und LES	10
2.4.2 Statistische Modellierung	11
2.4.2.1 Modellierungsansätze erster Ordnung	14
2.4.2.2 Modellierungsansätze zweiter Ordnung	15
<b>3 Theoretische Grundlagen: Verbrennung</b>	<b>19</b>
3.1 Chemische Reaktion	19
3.2 Chemie-Turbulenz Interaktion	20
3.3 Modellierung turbulenter Verbrennung	22
3.4 Diffusionsflammen	22
3.4.1 Das Modell des chemischen Gleichgewichts	23
3.4.2 Das Flamelet-Modell	25
3.4.3 Das ILDM-Modell	27
3.5 Erweiterung für Systeme mit Wärmeabgabe	30
3.6 Vorgemischte Verbrennung	31
3.6.1 Flammenstruktur und laminare Längenskalen	31
3.6.2 Interaktion Turbulenz-Flammenausbreitung	34
3.6.3 Modellierung turbulenter Vormischverbrennung mit G-Gleichung	38
3.6.3.1 Bereich gefaltete Flammen	38
3.6.3.2 Bereich der dünne Reaktionszonen	40

3.6.3.3 Verallgemeinerte G-Gleichung	41
3.6.3.4 Mittelung der G-Gleichung	42
3.6.3.5 Turbulente Brenngeschwindigkeit	44
3.7 Teilvorgemischte Verbrennung	47
3.8 Kopplung der G-Gleichung und des ILDM-Chemiemodells	49
3.8.1 Gemittelte Übergangswahrscheinlichkeit	51
<b>4 Wärmeübertragung durch Strahlung</b>	<b>53</b>
4.1 Strahlung	53
4.1.1 Beschreibung der angularen Abhängigkeit	55
4.1.2 $SP_N$ Methode	56
4.2 Ruß	64
4.2.1 Modellierung von Ruß	66
4.3 Validierung des Strahlungsmodells	67
4.4 Validierung des Rußmodells	71
<b>5 Numerisches Lösungsverfahren</b>	<b>74</b>
5.1 Diskretisierung der Differentialgleichungen	74
5.1.1 Finite Volumen Methode	74
5.1.2 Diskretisierungsverfahren	76
5.1.3 Lösungsverfahren	81
5.2 Numerische Behandlung der G-Gleichung	85
5.2.1 Level-set Method	85
5.2.2 Reinitialisierung	86
5.2.3 Berechnung der G-Gleichungsvariablen	89
5.3 Randbedingungen der Strömungs- und Skalarfelder	90
5.4 Randbedingungen für die Gleichung	95
<b>6 Simulation turbulenter Vormischflammen</b>	<b>96</b>
6.1 Pilotierte Jetflamme	96
6.1.1 Konfiguration und Randbedingungen	96
6.1.2 Ergebnisse und Diskussion	98
6.2 Simulation verdrallter Vormischflamme	106
6.2.1 Konfiguration und Randbedingungen	106
6.2.2 Ergebnisse und Diskussion	108
<b>7 Zusammenfassung</b>	<b>124</b>
<b>8 Literaturverzeichnis</b>	<b>127</b>

## Nomenklatur

### Lateinische Symbole

Symbol	Bedeutung	Einheit
$a_{\alpha\beta}$	Elementmatrix	[-]
$b_{ij}$	Anisotroper Tensor	[-]
$c_p$	Spezifische Wärmekapazität beim konstanten Druck	$[J\ kg^{-1}\ K^{-1}]$
$D$	Diffusionskoeffizient	$[m^2\ s^{-1}]$
$Da$	Damköhlerzahl	[-]
$G$	Abstand von der Flammenfront	$[m]$
$G_0$	0-Level der Flammenfront	$[m]$
$g$	Normierte Enthalpie	[-]
$g_i$	Erdbeschleunigungsvektor	$[m\ s^{-2}]$
$E_w$	Energiedichte	$[m^3\ s^{-2}]$
$h$	Enthalpie	$[J/kg]$
$I$	Strahlungsintensität	$[W\ m^{-2}\ sr^{-1}]$
$Ka$	Karlowitz-Zahl	[-]
$k$	Turbulente kinetische Energie	$[m^2\ s^{-2}]$
$k_w$	Wellenzahl	$[m^{-1}]$
$L$	Charakteristische Länge	$[m]$
$Le$	Lewis Zahl	[-]
$l$	Charakteristische Länge großer Wirbelstrukturen	$[m]$
$l_F$	Laminare Flammendicke	$[m]$

Symbol	Bedeutung	Einheit
$l_{F,t}$	Turbulente Flammendicke	[m]
$l_t$	Integrales Längenmaß	[m]
<b>M</b>	Molmasse	[kg mol <sup>-1</sup> ]
$\dot{m}$	Massenstrom	[kg <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]
$\vec{n}$	Normalvektor	[-]
<b>N</b>	Anzahl	-
$\tilde{N}_s$	Partikeldichte	[m <sup>-3</sup> ]
<b>p</b>	Statischer Druck	[Pa]
$\dot{q}_r$	Strahlungsquellterm	[Js <sup>-1</sup> m <sup>-3</sup> ]
$r_f, r_b$	Vorwärts- bzw. Rückwärtsreaktionsrate	[kmol m <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]
<b>Re</b>	Reynoldszahl	[-]
<b>U, U<sub>0</sub></b>	Charakteristische Geschwindigkeit	[m/s]
$u_j, \vec{u}$	Geschwindigkeitsvektor	[m/s]
$u, v, w$	Geschwindigkeitskomponenten	[m/s]
<b>V</b>	Volumen	[m <sup>3</sup> ]
$x_j$	Ortsvektor	[m]
<b>S</b>	Deformationstensor	[-]
$S_\varphi$	Allgemeiner Quellterm	-
$s_L$	Laminare Brenngeschwindigkeit	[m/s]
$s_t$	Turbulente Brenngeschwindigkeit	[m/s]
<b>T</b>	Temperatur	[K]
$T$	Spannungstensor	[-]
$Y_\alpha$	Massenbruch der Komponente $\alpha$	[-]
$Z_i$	Elementmassenbruch	[-]

## Griechische Symbole

Symbol	Bedeutung	Einheit
$\mu$	Dynamische Viskosität	[kg/(m s)]
$\delta_{ij}$	Kronecker Delta	[-]
$\eta$	Kolmogorov-Längenmaß	[m]
$\nu$	Kinematische Viskosität	[m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ]

Symbol	Bedeutung	Einheit
$\nu', \nu''$	Stöchiometrische Koeffizienten	[-]
$\nu_i$	Frequenz	[1/m]
$\Gamma_\varphi$	Allgemeiner Diffusionskoeffizient	[m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ]
$\tau_\eta$	Kolmogorov-Zeitmaß	[s]
$\varepsilon$	Dissipationsrate	[m <sup>2</sup> s <sup>-3</sup> ]
$\kappa$	Krümmung	[m <sup>-1</sup> ]
$\kappa_{abs}$	Absorptionskoeffizient	[m <sup>-1</sup> ]
$\lambda$	Wärmeleitfähigkeit	[Js <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> m <sup>-1</sup> ]
$\rho$	Dichte	[kg m <sup>-3</sup> ]
$\sigma$	Oberfläche	[m <sup>2</sup> ]
$\sigma_\varphi$	Turbulente Schmidt- bzw. Prandtl-Zahl	[-]
$\varphi$	Allgemeiner Skalar	
$\varphi_\nu$	Strahlungsfluss	[W m <sup>-2</sup> ]
$\xi$	Mischungsgrad	[-]
$\chi$	Skalare Dissipationsrate	[s <sup>-1</sup> ]
$\dot{\omega}_\alpha$	Chemischer Quellterm der Komponente $\alpha$	[kg m <sup>-3</sup> s <sup>-1</sup> ]
$\Phi$	Brennstoffzahl	[-]

## Symbole

Symbol	Bedeutung
'	Schwankungswert der Reynoldsmittelung
''	Schwankungswert der Favremittelung
--	Mittelwert der Reynoldsmittelung
~	Mittelwert der Favremittelung
∇	Nabla-Operator

### Indizes

#### Hochgestellte Indizes

Symbol	Bedeutung
$(\cdot)^b$	konditioniert auf den verbrannten Zustand
$(\cdot)^u$	konditioniert auf den unverbrannten Zustand
$(\cdot)^0$	Ungestreckt bzw. initialisiert

#### Tiefgestellte Indizes

Symbol	Bedeutung
$(\cdot)_b$	Bezogen auf den verbrannten Zustand
$(\cdot)_u$	Bezogen auf den unverbrannten Zustand
$\eta$	Kolmogorov-Skalen
$(\cdot)_t$	turbulent
$(\cdot)_L$	laminar

#### Abkürzungen allgemein

Symbol	Bedeutung
BML	Bray-Moss-Libby-Modell
CDS	<b>Central Differencing-Scheme</b>
CFD	<b>Computational Fluid Dynamics</b>
DNS	Direkt Numerische Simulation
ILDM	<b>Intrinsic Low Dimensional Manifolds</b>
KV	Kontrollvolumina
LES	<b>Large Eddy Simulation</b>
(J)PDF	<i>(Joint) Probability Density Function</i> , Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion
WSGG	<i>Weighted Sum of Gray Gases</i>
RANS	<i>Reynolds Averaged Navier-Stokes-Gleichungen</i>
SIP	<b>Strongly Implicit Procedure</b>
SP <sub>N</sub>	<b>Simplified Spherical Harmonics Method</b>
UDS	<b>Upwind Differencing Scheme</b>



# 1 Einleitung

## 1.1 Motivation

Zur Zeit werden weltweit mehr als 80% der Primärenergie über Verbrennungsprozesse in Nutzenergie umgewandelt. An dieser zentralen Rolle der Verbrennung in der Energieumwandlung wird sich trotz aller wünschenswerten Aktivitäten zur Erhöhung des Anteils regenerativer Energien auch in den kommenden Dekaden nichts Wesentliches ändern. Studien gehen davon aus, dass Energieverbrauch weltweit vor allem durch das Bevölkerungswachstum und die zunehmende Industrialisierung steigen wird. Dieser vermehrte Energiebedarf wird ebenfalls zu großen Teilen aus fossilen Brennstoffen gedeckt. Vor diesem Hintergrund steht die zwingende Notwendigkeit, in einem permanenten Prozess die Energieumwandlungsprozesse und die dazu eingesetzten Verbrennungstechnologien umwelt- und ressourcenschonend zu gestalten.

Eine besondere Bedeutung in der zukünftigen Energieversorgung unserer Welt kommt dabei den Gasturbinen zu, die in vielerlei Hinsicht besonders ressourcen- und umweltschonend sind. Zum einen weisen Gasturbinenprozesse heute schon einen außerordentlich hohen thermischen Wirkungsgrad von 60% auf, der in den kommenden Jahren weiter steigen wird. Aufgrund dieses hohen Wirkungsgrades, aber auch durch den Einsatz eines Brennstoffes mit hohem Wasserstoffgehalt ist die spezifische CO<sub>2</sub>-Emission dieser Kraftwerke außerordentlich gering. Auch die Ressourcenlage kann für die nächsten Dekaden als gesichert angesehen werden, so dass die Energieerzeugung mittels Gasturbinen heute vielfach als der Königsweg zur Lösung der Energieprobleme für die nahe Zukunft angesehen wird.

Es ist, wie in Rahmen des SFB 568 „Strömung und Verbrennung in zukünftigen Gasturbinenbrennkammern“ angedeutet wird, somit von einer rapide steigenden Bedeutung moderner Gasturbinentechnologie auszugehen. Für die beiden zentralen Anwendungsfälle dieser Technologie, Flugtriebwerk und stationäre Gasturbinen, sind nach gegenwärtigem Erkenntnisstand deutliche Bedarfzuwächse innerhalb der nächsten Dekaden zu erwarten. Die ständig wachsenden Anforderungen an effiziente Brennstoffnutzung und verbesserte Umweltverträglichkeit stellen eine große Herausforderung für die Industrie und Wissenschaft in der Entwicklung von neuen Gasturbinentechnologien dar. Die technische Entwicklung in der letzten Zeit hat zu Verbrennungskonzepten geführt, mit denen ein hoher Wirkungsgrad und eine erhebliche Verringerung der NO<sub>x</sub>-Emission erreicht wird. Anzuführen sind hier die vorgemischte, magere

Betriebsweise (LPP-Konzept, *Lean Premixed Prevaporized*) und die gestufte fett-mager Verbrennung (RQL-Konzept *Reach burn Quick quench Lean burnout*). Das LPP-Konzept erfordert eine vollständige Verdampfung und Vormischung eines flüssigen Brennstoffes vor der Verbrennung, so dass die niedrigen Temperaturen einer mageren Vormischflamme das Potenzial haben, die  $\text{NO}_x$ -Bildung um eine Größenordnung zu reduzieren. Das RQL-Konzept basiert auf einer Brennkammerstufung, wobei relativ niedrige Temperatur in der fetten Zone und schnelle Einmischung der Sekundärluft in der mageren Zone die Bildung von thermischem  $\text{NO}_x$  minimieren bei gutem Ausbrand. Hier stellen sich jedoch spezifische Probleme wie Rußbildung in der Primärzone und Kühlung des Flammenrohrs dar. Die zukünftige Weiterentwicklung dieser Technologie ist daran geknüpft, dass es gelingt, diese Reihe von technisch-wissenschaftlichen Wirkmechanismen zu verstehen und aufzuklären, die turbulente Strömung, vor allem aber die Beschreibung der vorgemischten und teilvorgemischten Verbrennung, des Stoff- und Wärmetransportes, der Rußbildung und die Wechselwirkung dieser Prozesse.

Detaillierte experimentelle Untersuchungen solcher komplizierter Verbrennungssysteme sind sehr teuer und manchmal nicht möglich, so dass keine vollständige Vorhersage dieser Prozesse erzielt werden kann. Im Laufe der vergangenen Jahre stellt die Anwendung numerischer Methoden u.a. im Rahmen der *Computational Fluid Dynamics* (CFD) eine kostensparende Alternative zur Untersuchung turbulenter reagierender Strömungen unter Gasturbinenbedingungen dar. Bis jetzt wurden aber wenige vollständige Modelle vorgeschlagen, die in der Lage sind, diese Prozesse zufriedenstellend zu beschreiben.

Im Vordergrund dieser Arbeit steht die Entwicklung eines Gesamtmodells zur Abbildung der Verbrennungsprozesse unter Vormisch- und Teilvormischbedingungen in modernen Gasturbinen und die Erweiterung der Verbrennungsmodelle im Hinblick auf Schadstoffemissionen ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ , Ruß) und Wärmetransport.

### 1.2 Stand der Forschung

Turbulente Verbrennungsforschung kann in zwei wesentliche Kategorien eingestuft werden: nicht vorgemischte Verbrennung und vorgemischte Verbrennung. Im allgemeinen sind bei der Modellierung unterschiedliche Näherungen notwendig, um jeden Verbrennungstyp zu beschreiben. Verbrennungssysteme der neuesten Generation mit niedrigen Emissionswerten und hoher Brennstoffausnutzung werden durch ein kombiniertes Konzept von zwei Verbrennungstypen realisiert, sogenannte teilvorgemischte Verbrennung.

Bei der Modellierung turbulenter nicht vorgemischter Verbrennung wird in erster Linie von dem Mischungszustand ausgegangen, der durch den Mischungsgrad

parametrisiert wird. Je nach Grad der Berücksichtigung der chemischen Vorgänge kann daher von einfachen Modellen, wobei der thermochemische Zustand nur vom Mischungsgrad abhängig ist (z.B. das Flammenflächen-Modell nach Burke und Schumann [15], das Modell des chemischen Gleichgewichts oder das *Eddy Dissipation Concept* nach Magnussen und Hjertager [71] bzw. Spalding [121]), zu komplizierten Modellen übergegangen werden. Beim stationären Flamelet-Modell nach Peters [90, 91] wird der chemische Prozess zusätzlich zu dem Mischungsgrad durch die skalare Dissipationsrate parametrisiert, die den Einfluss der turbulenten Zeitskalen auf die Chemie berücksichtigt. Für die Berücksichtigung kinetischer Prozesse, die einen wesentlichen Einfluss auf die Schadstoffbildung ausüben, werden komplexere Modelle verwendet, die in der Lage sind, die sogenannte *finite rate chemistry* Effekte abzubilden. Dabei greift man auf reduzierte Mechanismen zurück, die durch wenige Reaktionsfortschrittsvariablen parametrisiert werden können (z.B. die Methode der *Computational Singular Perturbations* von Massias *et al* [76], die Methode der *Intrinsic Low Dimensional Manifolds (ILDM)* nach Maas und Pope [70]). Zur Beschreibung der turbulenten Vormischflammen existieren unterschiedliche Modellierungsansätze. Einen genauen Überblick über die Methoden zur Modellierung der Vormischverbrennung geben u.a. auch Peters [89], Pope [98], Veynante & Poinso [96]. Hier wird nur Teil davon vorgestellt. Das *Eddy-Break Up* Modell (*EBU*), geht auf Spalding [121] zurück. Er verwendet für magere Gemische die Favre-gemittelte Transportgleichung für die Konzentration des Brennstoffes bzw. des Oxidators. Das *EBU*-Modell ist wegen der einfachen Schließung der Transportgleichungen attraktiv. Der Nachteil des Modells ist jedoch, dass die Modellparameter je nach Anwendung angepasst werden müssen. Das Flammenflächendichte-Modell wurde u.a. von Marble & Broadwell [74] hergeleitet. Dabei stellt die Flammenflächendichte ein Verhältnis zwischen Flammenfläche und Volumen dar. Als Flammenfläche wird dabei die Oberfläche der Flamme in einem Volumen bezeichnet. Die Untersuchungen von Duclos *et al.* [24] zeigen jedoch unbefriedigende Ergebnisse. Entwicklungsbedarf besteht in der Berücksichtigung der counter-gradient Diffusion und der molekularen Mechanismen. Im Rahmen des *BML*-Modells (siehe Bray *et al* [10, 11], Libby und Williams [67]) wird eine Transportgleichung für eine normierte Fortschrittsvariable gelöst, die gleich Null auf der unverbrannten Seite ist und gleich eins auf der verbrannten Seite. Eine für Teilvormischflammen geeignete Erweiterung wurde von Maltsev vorgeschlagen [73]. Die Modellierung des in die Gleichung für die Fortschrittsvariable eingehenden chemischen Quellterms ist sehr aufwändig gestaltet. Die Untersuchungen von Patel & Ibrahim [87] stellen eine starke Abhängigkeit der Ergebnisse von den Modellparametern fest. *PDF*-Methoden können sowohl im Bereich vorgemischter Verbrennung, als auch im Bereich teilvorgemischter und nicht vorgemischter Verbrennung eingesetzt werden [97]. Im Rahmen der *PDF*-Methode wird eine hochdimensionale Transportgleichung für die PDF gelöst. Numerisch wird sie häufig mittels einer Monte-Carlo Methode

behandelt. Dabei werden masselose Partikel, die Information über die PDF tragen, mittels einer Langrangeschen Methode durch das Strömungsfeld geführt. Die sehr komplexe Strategie und hoher Rechenzeitbedarf machen diese Methode weniger attraktiv. Die Modellierung der Vormischverbrennung mittels *G-Gleichung* geht auf Williams [133] zurück und wurde von der Gruppe um Peters weiterentwickelt. Die Erweiterung des *G-Gleichung-Modells* von Peters auf einen reduzierten Chemiemechanismus ermöglicht die verbesserte Vorhersage kinetisch bedingter Spezies und kann erfolgreich zur Modellierung der teilvorgemischten Verbrennung angewendet werden. Dieser Vorschlag wurde von Repp [103, 104] gemacht und auf einfachen 2D-Systemen getestet. In dieser Arbeit wird dieser Ansatz für 3D-Systeme weiterverfolgt.

### 1.3 Zielsetzung und Struktur der Arbeit

Die Zielsetzung dieser Arbeit ist die Anwendung des *G-Gleichung-Modells* von Peters [89] für die Berechnung der Verbrennung in Gasturbinenbrennkammern unter der Bedingungen von vollständiger oder partieller Vormischung und Erweiterung des Gesamtmodells zur Simulation der Verbrennungsprozesse mit dem Modell für Wärmeübertragung durch Strahlung und dem Rußmodell.

Der erste Schritt besteht in der Implementierung der obengenannten Modelle in einen komplexen dreidimensionalen CFD-Code für Berechnung von flexiblen Geometrien. Damit bietet sich die Möglichkeit zu Untersuchungen dieser Modelle an turbulenten reagierenden Strömungen mit hohem Komplexitätsgrad.

Anhand einer Serie von durchgeführten Validierungsrechnungen wird die Plausibilität der Verfahren festgestellt.

Im Kapitel 2 werden die theoretischen Grundlagen zur Beschreibung der turbulenten Strömungen vorgestellt. Daran anschließend werden im Kapitel 3 theoretische Grundlagen der Verbrennung diskutiert. Kapitel 4 beschäftigt sich mit den Modellen zur Beschreibung von Strahlungs- und Ruß- sowie Kopplungsmechanismen zwischen *G-Gleichung* und Chemie. Hier werden auch die Validierungsrechnungen gezeigt und diskutiert. Das notwendige numerische Lösungsverfahren, das in dieser Arbeit Anwendung findet, wird in Kapitel 5 dargestellt. Die Untersuchung der vorgemischten Flammen wird in Kapitel 6 dargestellt und diskutiert. U.a. wird die Berechnung einer offenen, verdrallten vorgemischten Methan-Luft-Flamme mit unterschiedlichen Reynolds-Zahlen in einer komplexen Geometrie durchgeführt. Die untersuchte Konfiguration ist in technischen Anwendungen wie Gasturbinenbrennkammern, deren Strömungen durch dreidimensionale Geschwindigkeitsfelder mit inneren Rückströmungszonen gekennzeichnet sind, die durch Verbrennung beeinflusst werden, von entscheidender Bedeutung für Funktion und Wirkungsgrad. Hier wird der Einfluss von Verbrennung auf Strömungsfeld untersucht. Abschließend erfolgt in Kapitel 7 eine Zusammenfassung der Ergebnisse dieser Arbeit.

## 2 Theoretische Grundlagen: Turbulenz

Das vorliegende Kapitel gibt einen Überblick über die theoretischen Grundlagen turbulenter reagierender Strömungen. Zuerst werden die wesentlichen physikalischen und chemischen Phänomene dargestellt. Danach werden Ansätze zur mathematischen Modellierung dieser Phänomene erläutert.

### 2.1 Eigenschaften turbulenter Strömungen

Technische Strömungen von Newton'schen Fluiden sind in der Regel turbulent und können durch die nachstehenden Eigenschaften charakterisiert werden:

- random in Raum und Zeit
- dreidimensional
- instationär
- rotationsbehaftet
- dissipativ (kinetische Energie wird durch Reibung in Wärme umgesetzt)

Eine turbulente Strömung entsteht infolge von Instabilitäten, die durch die Wechselwirkung von Reibungskräften und Trägheitskräften erzeugt werden. Das Verhältnis von Trägheits- zu Reibungskräften wird Reynoldszahl genannt und gibt ein Maß für die Klassifizierung der Strömung hinsichtlich des turbulenten Zustands an. Die Reynolds-Zahl ist wie folgt definiert:

$$\text{Re} = \frac{UL}{\nu}, \quad (2.1)$$

wobei  $U$  und  $L$  eine charakteristische Geschwindigkeit bzw. Länge der Strömung darstellen und  $\nu$  bezeichnet die kinematische Viskosität. Dabei definiert die sogenannte kritische Reynolds-Zahl  $\text{Re}_{\text{krit}}$  den Übergang von laminarer zu turbulenter Strömung. Für ein rundes Kreisrohr liegt die kritische Reynolds-Zahl bei  $\text{Re}_{\text{krit}} = 2300$ . Für  $\text{Re} > \text{Re}_{\text{krit}}$  kann man davon ausgehen, dass die Strömung turbulent ist.

### 2.2 Turbulente Skalen

Zur quantitativen Beschreibung turbulenter Strömungen definiert man ein ganzes Spektrum an Längen und Skalen (siehe Abb. 2.1). Um die Größenordnung der turbulenten Skalen vorzustellen geht man auf Kolmogorov [53] zurück. Nach seiner Annahme wird die turbulente kinetische Energie  $k$  von den großen zu kleinsten Wirbelstrukturen transportiert und in diesen kleinsten Wirbeln, in Abhängigkeit von der Viskosität mit der Dissipationsrate  $\varepsilon$ , in Wärme dissipiert. Aus dimensionsanalytischen Gründen folgt damit für das Längen- und Zeitmaß sowie für die Geschwindigkeitsskala

$$\eta = \left( \frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4}, \quad \tau_\eta = \left( \frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2} \quad \text{und} \quad u_\eta = \frac{\eta}{\tau_\eta} = (\nu \varepsilon)^{1/4} \quad (2.2)$$

Die Dissipationsrate  $\varepsilon$  lässt sich aus den großen Skalen mit dem turbulenten Zeitmaß  $\tau_t = l/k^{1/2}$  abschätzen zu

$$\varepsilon = \frac{k}{\tau_t} = \frac{k^{3/2}}{l} = \frac{u'^3}{l}, \quad (2.3)$$

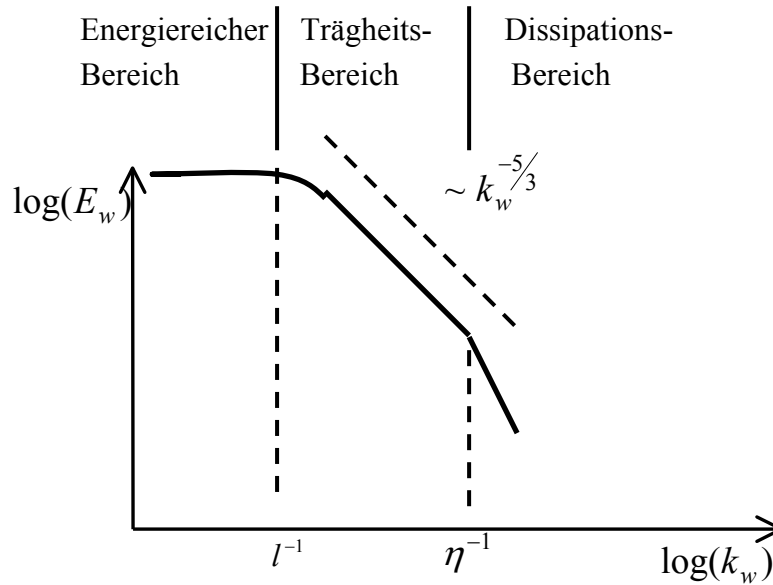
wobei  $u'$  die typische Geschwindigkeitsfluktuationen und die  $l$  die charakteristische Länge der großen Wirbelstrukturen bezeichnet. Über die Definition einer turbulenten

Reynoldszahl  $\text{Re}_t = \frac{k^{1/2} l}{\nu}$  kann der Zusammenhang zwischen den großen Wirbelstrukturen  $l$  und kleinsten Strukturen  $\eta$  formuliert werden.

$$\frac{\eta}{l} \sim \text{Re}_t^{-3/4} \quad (2.4)$$

Das Energiespektrum in Abbildung 2.1 stellt die Verteilung der Energie über den Wellenzahlbereich bzw. über das Frequenzspektrum.

Die maximalen Werte von  $E_w$  treten im Bereich der großen Wirbel bzw. energiereichen Strukturen der Größe  $l$ , auch *large eddies* genannt auf. Im Trägheitsbereich befinden sich die kleinen, „*small*“ eddies. Die Energiezufuhr von den großen zu den kleineren Skalen innerhalb des Trägheitsbereich ist von der Skalengröße unabhängig und ist proportional zu  $k_w^{-5/3}$ . Auf der rechten Seite des Trägheitsbereichs befinden sich Strukturen, die den Kolmogorov-Skalen  $\eta$  entsprechen. Turbulenz kann mit den Gleichungen der Kontinuumsmechanik beschrieben werden. Die Grundgleichungen der Strömungsmechanik und drei unterschiedliche Methoden für die Betrachtung der turbulenten Skalen werden im weiteren dargestellt.



**Abbildung 2.1** Energiespektrum einer turbulenten Strömung

### 2.3 Bilanzgleichungen

In diesem Kapitel wird die mathematische Behandlung der physikalischen Prozesse in turbulenten reagierenden Strömungen präsentiert. Zur vollständigen Beschreibung der Strömung ist die Formulierung der Kontinuitätsgleichung, der Transportgleichungen für Impuls und Stoff sowie der Energieerhaltungsgleichung notwendig.

Die **Kontinuitätsgleichung** in ihrer integralen Form lautet

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV}_I + \underbrace{\int_\sigma \rho \vec{u} \cdot \vec{n} d\sigma}_{II} = 0. \quad (2.5)$$

Hierbei bedeutet  $V$  ein Kontrollvolumen,  $\sigma$  ist die Fläche, die dieses Kontrollvolumen umfasst,  $\vec{u}$  ist der Strömungsgeschwindigkeitsvektor und  $\vec{n}$  bezeichnet ein Einheitsvektor, der normal zu  $\sigma$  ist und nach außen zeigt. Die physikalische Bedeutung der Gleichung (2.5) ist die Massenänderung in dem Kontrollvolumen  $V$  (Term  $I$ ), die von dem Massenstrom durch die Wände des Kontrollvolumens verursacht ist (Term  $II$ ). Die Anwendung des Gaußschen Divergenztheorem auf Term  $II$  ergibt

$$\int_\sigma \rho \vec{u} \cdot \vec{n} d\sigma = \int_V \text{div}(\rho \vec{u}) dV \quad (2.6)$$

und die Gleichung (2.5) kann folgendermaßen umgeschrieben werden:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV + \int_V \text{div}(\rho \vec{u}) dV = 0. \quad (2.7)$$

In differentieller Form und kartesischen Koordinatensystem lautet die Massenbilanz:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0. \quad (2.8)$$

Die **Impulserhaltungsgleichung** in der integralen Form lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \vec{u} dV + \int_{\sigma} \rho \vec{u} \vec{u} \cdot \vec{n} d\sigma = \int_{\sigma} \mathbf{T} \cdot \vec{n} d\sigma + \int_V \rho \vec{f} dV \quad (2.9)$$

Die rechte Seite in (2.9) stellt die Kräfte dar, die in einem Kontrollvolumen wirken:

- Oberflächenkräfte  $\int_{\sigma} \mathbf{T} \cdot \vec{n} d\sigma$  (Druck, Normal- und Schubspannungen, Oberflächenspannungen)
- Volumenkräfte  $\int_V \rho \vec{f} dV$  (Gravitation, Elektromagnetische Kraft).

In (2.9) repräsentiert  $\mathbf{T}$  den Spannungstensor, der den molekularen momentanen Fluss durch die Oberfläche darstellt. Für Newton'schen Fluide kann dieser Tensor wie folgt ausgedrückt werden:

$$\mathbf{T} = - \left( p + \frac{2}{3} \mu \operatorname{div} \vec{u} \right) \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{S}. \quad (2.10)$$

Hierbei ist  $\mu$  die dynamische Viskosität,  $p$  bezeichnet den statischen Druck,  $\mathbf{I}$  ist der Einheitstensor und  $\mathbf{S}$  ist Deformationstensor:

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \left( \operatorname{grad} \vec{u} + (\operatorname{grad} \vec{u})^T \right). \quad (2.11)$$

(2.10) und (2.11) in kartesischen Koordinaten lauten:

$$T_{ij} = - \left( p + \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} + 2\mu S_{ij} \quad (2.12)$$

und

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (2.13)$$

(2.12) wird in Druck- und Viskosanteil aufgetrennt, wobei für den letzten gilt:

$$T_{ij}^v = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right). \quad (2.14)$$

Wird die Gleichung (2.9) in differentieller Form und in den kartesischen Koordinaten aufgeschrieben, und die Gravität  $g$  ist die einzige Volumenkraft, dann bekommt man für die Impulserhaltungsgleichung folgenden Ausdruck:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right] + \rho g_i. \quad (2.15)$$

Um eine reagierende Strömung zu beschreiben, sind Stofftransportgleichung und Energiegleichung erforderlich. Die Stoffkonzentration eines Stoffes oder die Energie



in der Form von Enthalpie oder Temperatur sind Skalare. Generell, für eine **Skalargleichung** in ihrer integralen Form gilt:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \varphi dV + \int_{\sigma} \rho \varphi \vec{u} \cdot \vec{n} d\sigma = \sum f_{\varphi}, \quad (2.16)$$

hierbei bezeichnet  $\varphi$  ein Skalar und  $f_{\varphi}$  repräsentiert alle anderen Transportmechanismen außer der Konvektion. Diffusiver Transport kann mittels des Fourier'schen bzw. Fick'schen Gesetzes dargestellt werden:

$$D_{\varphi} = \Gamma_{\varphi} \text{grad} \varphi \quad (2.17)$$

In (2.17) bezeichnet  $\Gamma_{\varphi}$  der Wärme- oder Massendiffusionskoeffizienten. Einsetzen (2.17) in (2.16) und bezeichnen aller Quellen und Senken als  $S_{\varphi}$  ergibt:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \varphi dV + \int_{\sigma} \rho \varphi \vec{u} \cdot \vec{n} d\sigma = \int_{\sigma} \Gamma_{\varphi} \text{grad} \varphi \cdot \vec{n} d\sigma + \int_V S_{\varphi} dV \quad (2.18)$$

In kartesischer differentieller Form gilt für (2.18):

$$\frac{\partial \rho \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j \varphi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_{\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) + S_{\varphi} \quad (2.19)$$

### 2.4 Modellierung turbulenter Strömungen

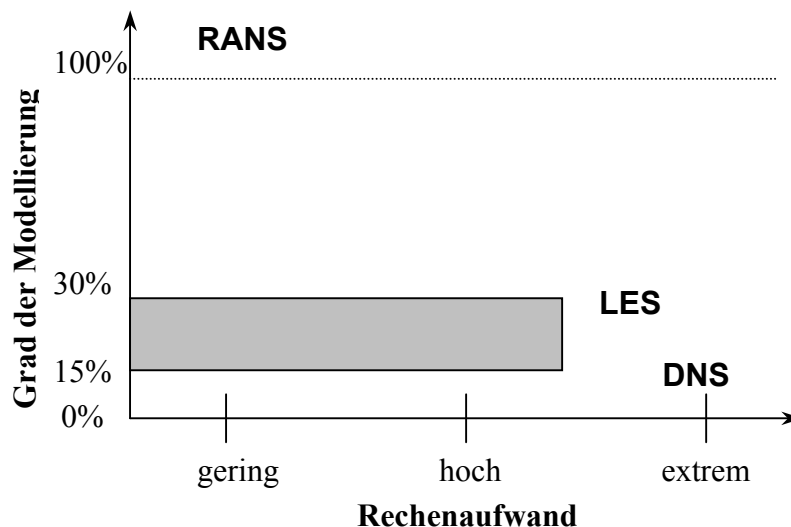
In den vorigen Kapiteln wurden die Eigenschaften turbulenter Strömung diskutiert und erläutert. Danach wurden die Gleichungen für die Beschreibung dieser Strömungen vorgestellt. Als nächstes werden die drei grundsätzlichen Ansätze zur numerischen Lösung dieser Gleichungen dargestellt. Sie sind:

1. Direkte Numerische Simulation (DNS)  
Alle vorkommenden Zeit- und Längenskalen (Abb. 2.1) werden aufgelöst, keine Modellierung notwendig.
2. Grobstruktursimulation (*Large Eddy Simulation*, LES)  
Man bestimmt eine Grenzwellenlänge zur Auflösung von turbulenten Zeit- und Längenmaß. Elemente kleiner einer gewählten Länge werden durch einfache Feinstrukturmodelle abgebildet.
3. Statistische Turbulenzmodellierung (*Reynolds-Averaged Navier-Stokes-equations*, RANS)  
Alle Größen werden als gemittelt betrachtet. Der Einfluss der Turbulenz erfolgt über komplexere Turbulenzmodelle mit hohem Modellierungsgrad.

Abbildung 2.2 stellt einen Vergleich dieser Ansätze bezüglich Rechenaufwand und Modellierungsgrad dar.

### 2.4.1 DNS und LES

Die Abbildung 2.2 zeigt, dass die direkte numerische Simulation (DNS) einer turbulenten Strömung den höchsten Rechenaufwand benötigt, allerdings wird kein vereinfachendes Modell verwendet. Zur direkten Anwendung der Bilanzgleichungen (2.8-2.19) müssen auch die kleinsten Turbulenzelemente  $\eta$  durch Diskretisierung aufgelöst werden.



**Abbildung 2.2:** Vergleich verschiedener Simulationsmöglichkeiten bezüglich Rechenaufwand und Modellierungsgrad

Dies ergibt eine Gitterpunktanzahl zur räumlichen Diskretisierung, die proportional  $Re_t^{9/4}$  ist. Weiterhin fordert die kleine Gitterweite aufgrund numerischer Stabilität extrem kurze Zeitschrittweiten. Bei reaktiven Strömungen lässt die Berücksichtigung chemischer Zeit- und Längenskalen den Rechenaufwand weiter steigen. Die exakte Formulierung der Randbedingungen ist sehr kompliziert wegen dem randomen Charakter der turbulenten Strömung. Aus diesen Gründen bleibt der Aufwand der DNS-Methode für technisch relevante Konfigurationen bis auf Weiteres hoch und nur die Simulation von Strömungen mit niedrigen Reynoldszahlen ist möglich. Trotz dieser Tatsache liefern die DNS-Simulationen wertvolle Daten über die Dynamik der untersuchten Strömung. Bei einer DNS liegen alle Strömungsgrößen an jedem Ort zu jedem Zeitpunkt vor, so dass alle notwendigen statistischen Größen zur Analyse verfügbar sind.

Eine Alternative zur DNS-Methode mit dem Problem der hohen Skalenaufösung stellt die sogenannte Grobstruktursimulation oder *Large Eddy Simulation* (LES) dar, wobei die Gleichungen (2.8-2.19) tiefpassgefiltert gelöst werden. Das verursacht

natürlich einen Informationsverlust. Die großen Skalen werden weiterhin direkt simuliert. Im Gegensatz zu den großen Skalen werden die kleineren Skalen, vom Trägheitsbereich (Abb.2.1) bis zur Kolmogorov-Länge, durch einen Ansatz modelliert. Diese Vorgehensweise ist recht erfolgreich, weil die kleinen Turbulenzstrukturen bei hohen Reynoldszahlen nahezu lokal isotrop sind und relativ einfach zu modellieren sind. Weiterhin ist der turbulente Transport im Raum durch die großen, energiereichen Strukturen maßgeblich bestimmt, welche die LES-Methode direkt abbildet. Die Grenze zwischen aufgelösten und modellierten Skalen muss innerhalb des Trägheitsbereichs liegen.

Die Modellierung geht davon aus, dass von den aufgelösten Strukturen auf die nichtaufgelösten Strukturen geschlossen werden kann. Zu Anwendung kommen einfache Gradienten-Fluss-Ansätze [119] oder dynamische Modelle [30], die Koeffizienten des Gradienten-Fluss-Ansatzes aus der Dynamik des aufgelösten Strömungsfeldes extrapolieren und daher Vorteile besitzen bei nicht äquidistanten Gittern. Auf Grund künftig steigender Rechnerleistung nimmt LES immer mehr Raum ein. Die LES nichtreagierender Strömung zeigt erste vielversprechende Ergebnisse. Die grundsätzlichen Probleme der LES finden sich in der Formulierung der Randbedingungen. Es müssen realistische, instationäre Ein- und Austrittsbedingungen definiert werden. Besondere Schwierigkeiten entstehen bei der Erfassung von wandnahen Strömungen. Um die Turbulenzstrukturen der Randschicht aufzulösen benötigt man extrem feine Gitter. Deswegen kommt meistens das logarithmische Wandgesetz zum Einsatz, wobei die Auflösung an der Wand nicht verfeinert werden muss.

### 2.4.2 Statistische Modellierung

Die am weitesten verbreitete Methode, die sogenannte RANS-Technik, hat ihren Namen von Sir Osborn Reynolds bekommen, der das Konzept statistischer Betrachtung der Navier-Stokesschen Gleichungen vorgeschlagen hat. Durch Ensemblemittelung können die Navier-Sokesschen Gleichungen in Gleichungen zur Beschreibung von statistischen Momenten, meistens Mittelwert (Momente erster Ordnung) und Varianzen (Momente zweiter Ordnung), umgewandelt werden. Ganz allgemein gilt für einen Ensemblemittelwert einer beliebigen Variable

$$\overline{\varphi}(\mathbf{x}, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \varphi^i(\mathbf{x}, t) \quad (2.20)$$

Für eine statistisch stationäre Strömung kann der Mittelwert als

$$\overline{\varphi}(\mathbf{x}) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \varphi(\mathbf{x}, t) dt \quad (2.21)$$

gebildet werden. Der momentane Zustand dieser Variable setzt sich zusammen aus Mittelwert und Fluktuation

$$\varphi(\mathbf{x}, t) = \overline{\varphi}(\mathbf{x}) + \varphi'(\mathbf{x}, t). \quad (2.22)$$

Wichtige Eigenschaften der statistischen Mittelung sind:

$$\begin{aligned}
 \overline{\overline{\phi}} &= \overline{\phi}, \\
 \overline{\phi \phi} &= \overline{\phi} \overline{\phi}, \\
 \overline{\phi'} &= 0, \\
 \overline{\phi' \phi} &= 0, \\
 \overline{\phi' \phi'} &\neq 0.
 \end{aligned} \tag{2.23}$$

Dekomposition des Geschwindigkeitsvektors mittels (2.22) ergibt

$$u_i = \overline{u}_i + u'_i. \tag{2.24}$$

Für den Druck gilt

$$p = \overline{p} + p' \tag{2.25}$$

und für einen Skalar

$$\phi = \overline{\phi} + \phi'. \tag{2.26}$$

Entsprechendes Einsetzen (2.24), (2.25) und (2.26) in (2.8), (2.15) und (2.19) und Mittelung mit Hilfe von (2.23) ergibt das Reynoldsgemittelte Gleichungssystem mit konstanter Dichte:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{u}_i) = 0. \tag{2.27}$$

$$\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u}_j \overline{u}_i) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \nu \frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} - \overline{u'_i u'_j} \right) + g_i \tag{2.28}$$

$$\frac{\partial \overline{\phi}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u}_j \overline{\phi}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\Gamma_\phi}{\rho} \frac{\partial \overline{\phi}}{\partial x_j} - \overline{u'_i \phi'} \right) + \overline{S}_\phi \tag{2.29}$$

Bei großen Reynoldszahlen werden die molekulare Viskosität in (2.28) und der Diffusionskoeffizient in (2.29) sehr klein im Vergleich mit anderen Komponenten. Aus diesem Grund werden diese Terme im weiteren vernachlässigt. Das Gleichungssystem (2.27)-(2.29) kann folgendermaßen umgeschrieben werden:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{u}_i) = 0. \tag{2.30}$$

$$\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u}_j \overline{u}_i) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (-\overline{u'_i u'_j}) + g_i \tag{2.31}$$

$$\frac{\partial \overline{\phi}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u}_j \overline{\phi}) = \frac{\partial}{\partial x_j} (-\overline{u'_i \phi'}) + \overline{S}_\phi \tag{2.32}$$

Die Gleichungen (2.31) und (2.32) enthalten ungeschlossene Terme wie Reynold'sche Spannung  $\overline{u'_i u'_j}$ , Skalarfluss  $\overline{u'_i \phi'}$  und chemischen Quellterm  $\overline{S_\phi}$  auf deren Modellierung sich die RANS-Methode konzentriert.

Der große Nachteil der Reynoldsmittelung ist, dass bei Verbrennungsprozessen, in denen die Dichte stark schwankt, viele unbekannte Dichteschwankungskorrelationen auftreten. Das Problem kann mittels Favre-Mittelung gelöst werden. Dabei wird eine Dichtegewichtung implizit in der Mittelungsprozedur eingeführt. Für eine beliebige Variable gilt:

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' \quad (2.33)$$

Der Mittelwert wird per Definition durch

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho \phi}}{\bar{\rho}} \quad (2.34)$$

gebildet. Wichtige Eigenschaften sind

$$\begin{aligned} \overline{\phi''} &= -\frac{\overline{\rho' \phi}}{\bar{\rho}} \neq 0, \\ \overline{\rho \phi} &= \bar{\rho} \tilde{\phi}, \\ \overline{\rho \phi''} &= 0. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Dekomposition des Geschwindigkeitsvektors und eines Skalars auf Favre- Mittelwert und -Fluktuation ergibt:

$$u_i = \tilde{u}_i + u''_i \quad (2.36)$$

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi''. \quad (2.37)$$

Das Favre-gemittelte Gleichungssystem lautet:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0. \quad (2.38)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (-\bar{\rho} \tilde{u}_i'' \tilde{u}_j'') + \bar{\rho} g_i \quad (2.39)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\phi}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{\phi}) = \frac{\partial}{\partial x_j} (-\bar{\rho} \tilde{u}_i'' \phi') + \bar{S}_\phi \quad (2.40)$$

Die Modelle zur Behandlung der unbekannten Korrelationen  $\widetilde{u_i''u_j''}$  und  $\widetilde{u_i''\varphi''}$  werden nach der Ordnung der Statistischen Momente der Geschwindigkeitskomponenten klassifiziert und werden einzeln in den folgenden Abschnitten diskutiert.

### 2.4.2.1 Modellierungsansatz erster Ordnung

Bei Momentenmodellen erster Ordnung werden die unbekannten Korrelationen mit Hilfe bekannter Größen über einen algebraischen Ansatz modelliert. Da die Korrelationen der Schwankungsgrößen der Geschwindigkeiten  $\widetilde{u_i''u_j''}$  wie eine zusätzliche Spannung wirken, werden sie als Reynolds'scher Spannungstensor bezeichnet. Der Term  $\widetilde{u_i''\varphi''}$  wird als Vektor des skalaren Flusses bezeichnet. Von Boussinesq wurde ein diffusiver Einfluss dieser Terme beobachtet, was zu der Wirbelviskositäts- oder Boussinesq-Hypothese für den Reynolds'schen Spannungstensor führt:

$$\widetilde{u_i''u_j''} = \frac{2}{3} \widetilde{k} \delta_{ij} - \nu_t \left( \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right). \quad (2.41)$$

Hierbei ist  $\nu_t$  die turbulente Wirbelviskosität, die durch den turbulenten Austausch von Fluidelementen bedingt ist und als

$$\nu_t = C_\mu \frac{\widetilde{k}^2}{\widetilde{\varepsilon}} \quad (2.42)$$

definiert werden kann. Die turbulente kinetische Energie ist entsprechend

$$\widetilde{k} = \frac{1}{2} \widetilde{u_i''u_i''} \quad (2.43)$$

definiert.

Zur Bestimmung der turbulenten Viskosität  $\nu_t$  werden unterschiedliche Ansätze verwendet. Null-Gleichungsmodelle erhalten keine weiteren Differentialgleichungen. Der Mischungswegansatz nach Prandtl [101] beschreibt die Verteilung der turbulenten Viskosität als Funktion eines Längenmaßes, der Mischungslänge und eines Geschwindigkeitsmaßes. Ein-Gleichungsmodelle benötigen die Lösung der Erhaltungsgleichung der turbulenten kinetischen Energie. Dabei ist die turbulente Viskosität die Funktion der turbulenten kinetischen Energie und des integralen Längenmaßes [102, 134]. In Zwei-Gleichungsmodellen wird neben der Erhaltungsgleichung der turbulenten kinetischen Energie eine Erhaltungsgleichung zur Bestimmung des turbulenten Längenmaßes gelöst. Das  $\widetilde{k} - \varepsilon$ -Modell von Jones und Launder [46] enthält die Erhaltungsgleichung der Dissipation  $\widetilde{\varepsilon}$  zur Herleitung des integralen Längen- und Zeitmaßes. Dabei wird Gleichgewichtsturbulenz vorausgesetzt, was bedeutet, dass die Dissipation der turbulenten Energie auf den kleinsten Skalen nur durch die Produktion auf den großen Strukturen, ausgedrückt durch  $\widetilde{k}$  und  $\widetilde{\varepsilon}$ , bestimmt wird.

Die Skalar-Geschwindigkeits-Korrelationen werden im Rahmen der Wirbelviskositätshypothese über einen Gradienten-Flussansatz als

$$\widetilde{u_i''\varphi''} = -\left(\frac{\nu_t}{\sigma_{\varphi 1}}\right) \frac{\partial \widetilde{\varphi}}{\partial x_i} \quad (2.44)$$

modelliert. Die Konstante  $\sigma_{\varphi 1}$  stellt eine turbulente Schmidt- bzw. Prandtl-Zahl dar.

Die Favregemittelten Transportgleichungen für  $\widetilde{k}$  und  $\widetilde{\varepsilon}$  lauten im Rahmen des Zwei-Gleichungsmodells:

$$\frac{\partial \widetilde{\rho k}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\widetilde{\rho u_j k}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \widetilde{\rho} \frac{\nu_t}{\sigma_k} \frac{\partial \widetilde{k}}{\partial x_j} \right) - \widetilde{\rho \varepsilon} - \widetilde{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_j} \quad (2.45)$$

$$\frac{\partial \widetilde{\rho \varepsilon}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\widetilde{\rho u_j \varepsilon}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \widetilde{\rho} \frac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \widetilde{\varepsilon}}{\partial x_j} \right) - \widetilde{\rho C_{\varepsilon 2}} \frac{\widetilde{\varepsilon}^2}{\widetilde{k}} - C_{\varepsilon 1} \frac{\widetilde{\varepsilon}}{\widetilde{k}} \widetilde{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_j}. \quad (2.46)$$

Der erste Term auf der rechten Seite der Gleichung (2.45) bezeichnet den turbulenten Transport, der zweite die Dissipation der turbulenten Energie und der dritte Term bezeichnet die der turbulenten Energie. In der Gleichung (2.46) bezeichnet der erste Term auf der rechten Seite den Transport, der nächste die Destruktion und der letzte die Produktion. Für die Reynolds-Spannungen und den Skalarfluss werden entsprechend die Ansätze (2.41) und (2.44) angewendet. Damit ergibt sich ein geschlossenes Gleichungssystem, das die Turbulenz in Form von Impuls-, Energie-, und Stoffkomponentengleichung beschreibt. Die Modellkonstanten sind in der Tabelle 2.1 angegeben. Das  $k - \varepsilon$ -Modell ist in der Lage eine Vielzahl von technischen Strömungen zufriedenstellend zu beschreiben. Es erfreut sich nicht zuletzt wegen seiner numerischen Robustheit in der industriellen Anwendung großer Beliebtheit.

**Tabelle 2.1** Konstanten des  $k - \varepsilon$ -Modells

$C_\mu$	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$\sigma_k$	$\sigma_\varepsilon$	$\sigma_\varphi$
0.09	1.44	1.9	1.0	1.3	0.7

### 2.4.2.2 Modellierungsansatz zweiter Ordnung

Die Modelle zweiter Ordnung zeichnen sich dadurch aus, dass sie vollständige Transportgleichungen für die unbekannte Korrelationen lösen. Diese lassen sich wiederum aus den Navier-Stokes-Gleichungen herleiten. Die anschließende Favre-Mittelung führt zur Transportgleichung des Reynolds'schen Spannungstensors:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho u_i'' u_j''}) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\overline{\rho u_k'' u_i'' u_j''}) = & \frac{\partial}{\partial x_k} \left( - \underbrace{\overline{\rho u_k'' u_i'' u_j''}}_{\text{Turbulenter Transport}} \right) - \underbrace{\left( \frac{\overline{\rho u_i''}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \frac{\overline{\rho u_j''}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \right)}_{\text{Pr ef Beschleunigung } \Phi_{ij}} \\
 & - \underbrace{\overline{\rho u_i'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} - \overline{\rho u_j'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k}}_{\text{Pr oduktion}} - \underbrace{\left( \overline{p' \frac{\partial u_i''}{\partial x_j}} + \overline{p' \frac{\partial u_j''}{\partial x_i}} \right)}_{\text{Druckkorrelationen } \phi_{ij}} - \underbrace{\left( \overline{\tau_{jk}'' \frac{\partial u_i''}{\partial x_k}} + \overline{\tau_{ik}'' \frac{\partial u_j''}{\partial x_k}} \right)}_{\text{Viskose Dissipation } \bar{\rho} \varepsilon_{ij}}
 \end{aligned} \quad (2.47)$$

In der Gleichung (2.47) sind die Terme für die Dissipation, Druckkorrelation, der turbulente Transportterm und die Terme, die den mittleren Druckgradienten erhalten, mathematisch nicht geschlossen und müssen modelliert werden.

### Druck-Scher-Korrelationsterm

Die Druck-Scher-Korrelation bewirkt eine Umverteilung von turbulenter Energie innerhalb des Reynolds'schen Spannungstensors. Üblicherweise wird dieser Term in zwei Anteile, den sogenannten *Rapid* Term  $M_{ijkl}$ , der proportional zum Gradienten der mittleren Geschwindigkeit ist, und den *Return* Term  $A_{ij}$ , der die Relaxation der turbulenten Strömung in einen isotropen Zustand bewirkt, aufgespalten:

$$\Pi_{ij} = M_{ijkl} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_l} + A_{ij}. \quad (2.48)$$

Der allgemeinste lineare Ansatz zur Modellierung von (2.48) lautet:

$$\begin{aligned}
 \Pi_{ij} = & -C_1 \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} \left( \frac{\overline{u_i'' u_j''}}{\tilde{k}} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \right) + C_2 \delta_{ij} \overline{\rho u_k'' u_l''} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_l} + C_3 \bar{\rho} \left( \overline{u_i'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} - \overline{u_j'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} \right) \\
 & + C_4 \bar{\rho} \tilde{k} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \delta_{ij} - \left( \frac{3}{2} C_2 + C_3 \right) \left( \overline{\rho u_i'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_j} + \overline{\rho u_j'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_i} \right).
 \end{aligned} \quad (2.49)$$

Das bekannteste Modell von Launder et al [64] benutzt zur Kalibrierung des Koeffizienten  $C_1$  die abklingende, anisotrope homogene Turbulenz. Zur Kalibrierung des scherungsbehafteten Anteils ( $C_2$  bis  $C_4$ ) werden neben bestimmten einschränkenden Tensoreigenschaften homogene Scherströmungen und turbulente Grenzschichtströmungen herangezogen. Im Gegensatz hierzu verwendet das Modell von Jones und Musonge [47] bzw. Jones [45] die direkte lineare Abhängigkeit von der Anisotropie des Reynoldsschen Spannungstensors, definiert als

$$b_{ij} = \frac{\overline{u_i'' u_j''}}{\tilde{k}} - \frac{2}{3} \delta_{ij}.$$

Die Modellkoeffizienten für die oben genannten Modelle sind in der Tabelle 2.2 zusammengefasst.



**Tabelle 2.2** Modellkoeffizienten der Schließungsmodellen zweiter Ordnung

Modelle	$C_1$	$C_2$	$C_3$	$C_4$	$C_\varepsilon$	$C_{\varepsilon_1}$	$C_{\varepsilon_2}$	$C_{\varepsilon_3}$
Jones [45]	3.0	-0.44	0.46	-0.23	0.18	1.4	1.9	0.95
Launder et. al [64]	1.5	0.582	0.764	-0.182	0.15	1.44	1.9	0

### Turbulenter Transport

Der turbulente Transportterm besteht aus der Tripelkorrelation und den Drucktransporttermen und wird nach Shir [101] modelliert:

$$T_{ijk} = - \left( \overline{\rho u_k'' u_i'' u_j''} + \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{p' u_k''} \delta_{ij} \right) = C_\varepsilon \bar{\rho} \frac{k^2}{\varepsilon} \frac{\partial \widetilde{u_i'' u_j''}}{\partial x_k}. \quad (2.50)$$

### Dissipationsterm

Die Transportgleichung der Dissipationsrate  $\tilde{\varepsilon}$  für Reynolds-Spannungsmodelle zweiter Ordnung lautet:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\varepsilon}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{\varepsilon}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( C_\varepsilon \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_j} \right) - \bar{\rho} C_{\varepsilon_2} \frac{\tilde{\varepsilon}^2}{\tilde{k}} - C_{\varepsilon_1} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}. \quad (2.51)$$

Analog zu Gleichung (2.47) wird die Gleichung für den skalaren Fluss hergeleitet:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} u_i'' \widetilde{\varphi''}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j u_i'' \widetilde{\varphi''}) = & \underbrace{- \bar{\rho} u_i'' u_j'' \frac{\partial \widetilde{\varphi}}{\partial x_j} - \bar{\rho} u_j'' \varphi'' \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}}_{\text{Produktion}} \\ & - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} ((\bar{\rho} u_i'' u_j'' \widetilde{\varphi''}) + p' \widetilde{\varphi})}_{\text{Turbulenter Transport}} - \underbrace{\left( \varphi'' \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_j} + p' \frac{\partial \widetilde{\varphi}}{\partial x_i} \right)}_{\text{Druckkorrelationen}} - \underbrace{\left( \tau_{jk}'' \frac{\partial \widetilde{\varphi}}{\partial x_k} + \tau_{ik}'' \frac{\partial u_j''}{\partial x_k} \right)}_{\text{Viskose Dissipation}} + \overline{u_j'' \dot{\omega}_\varphi} \quad (2.52) \end{aligned}$$

### Turbulenter Transport

Der turbulente Transportterm in der Skalarflussgleichung lässt sich analog dem turbulenten Transportterm für die Reynoldssche Spannungen modellieren:

$$T_{ij\phi} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( C_s \bar{\rho} \frac{k^2}{\varepsilon} \frac{\partial \widetilde{u_j''\phi''}}{\partial x_j} \right) \quad (2.53)$$

### Druck-Skalargradienten-Korrelation

Für die Modellierung der Druck-Skalargradienten-Korrelation wurden verschiedene Ansätze vorgeschlagen [45, 47, 62]. Das einfachste Modell von Launder et al [47] stellt die Druck-Skalargradienten-Korrelation folgenderweise dar:

$$\Pi_j = \bar{\rho} \left( -C_1 \frac{\varepsilon}{k} \widetilde{u_j''\phi''} + C_2 \widetilde{u_i''\phi''} \frac{\partial \widetilde{u_j}}{\partial x_i} \right) \quad (2.53)$$

In dem Modell von Jones [33] tritt in dem *Return*-Term eine zusätzliche Abhängigkeit von dem mittleren Skalargradient auf:

$$\Pi_j = \bar{\rho} \left( -C_1 \frac{\varepsilon}{k} \widetilde{u_j''\phi''} - C_2 k 2b_{ij} \frac{\partial \widetilde{\phi}}{\partial x_j} + \left[ C_3 \widetilde{u_i''\phi''} \delta_{ij} + C_4 \left( \widetilde{u_j''\phi''} \delta_{ik} + \widetilde{u_i''\phi''} \delta_{jk} \right) \right] \frac{\partial \widetilde{u_j}}{\partial x_k} \right). \quad (2.54)$$

Die Modellkonstanten für den Druck-Skalar-Korrelationsterm sind in der Tabelle 2.3 zusammengefasst.

**Tabelle 2.3:** Modellkonstanten für den Druck-Skalar-Korrelationsterm.

Modelle	$C_1$	$C_2$	$C_3$	$C_4$
LS [62]	3.0	0.33	0	0
Jones [45]	$3.0/(1 + 3.0\sqrt{II})$	0.12	1.09	0.51

Neben der Turbulenzmodellierung, das die Bewegung des Fluides beschreibt, spielt bei reagierenden Strömungen die Modellierung der chemischen Quellterme  $\bar{S}_\phi$  in (2.32) eine zentrale Rolle. Auf die Modellierung der Chemie wird in dem nächsten Kapitel eingegangen.

### 3. Theoretische Grundlagen: Verbrennung

Dieses Kapitel beschreibt die physikalischen Grundlagen der Verbrennungsprozesse und führt eine geeignete mathematische Formulierung zu deren Erfassung ein. Insbesondere soll die Modellierung des Quellterms  $\bar{S}_\phi$  in (2.44), der aus den stattfindenden chemischen Reaktionen hervorgeht, erläutert werden.

#### 3.1 Chemische Reaktion

Chemische Reaktionen lassen sich entsprechend dem folgenden Ansatz beschreiben:

$$\sum_{\alpha=1}^{N_{Sp}} \nu'_{\alpha,i} Sp_\alpha \leftrightarrow \sum_{\alpha=1}^{N_{Sp}} \nu''_{\alpha,i} Sp_\alpha \quad i = 1, N_{ER} \quad (3.1)$$

Die  $\nu'_{\alpha,i}$  und  $\nu''_{\alpha,i}$  bezeichnen die stöchiometrischen Koeffizienten, die die Anzahl der an der Reaktion beteiligten Moleküle angeben, und  $Sp_\alpha$  stehen für die Spezies  $\alpha$ . Die Reaktion der Form (3.1) kann grundsätzlich vorwärts und rückwärts ablaufen mit entsprechender Abbau- bzw. Produktionsrate. Die Geschwindigkeit einer Elementarreaktion, die sogenannte Reaktionsrate, kann durch den Ansatz

$$r_f = k_f(T) \prod_{\alpha} c_{\alpha}^{\nu'_{\alpha}} \quad \text{bzw.} \quad r_b = k_b(T) \prod_{\alpha} c_{\alpha}^{\nu''_{\alpha}} \quad (3.2)$$

beschrieben werden, wobei  $f$  für Vorwärtsreaktionen und  $b$  für Rückwärtsreaktionen stehen. Die Größen  $c_{\alpha} = \frac{Y_{\alpha} \rho}{M_{\alpha}}$  und  $k_f$  bzw.  $k_b$  geben die Mol-dichte der Spezies  $\alpha$

und die Geschwindigkeitskoeffizienten an. Durch Summierung der Reaktionsraten aller betrachteten Elementarreaktionen ergibt sich der Quellterm der Spezies  $\alpha$ , der in die Speziestransportgleichung eingeht:

$$S_{\alpha} = \sum_k^{N_{ER}} (\nu''_{\alpha,k} - \nu'_{\alpha,k}) (r_{f,k} - r_{b,k}). \quad (3.3)$$

Die Geschwindigkeitskoeffizienten  $k_f$  bzw.  $k_b$  werden empirisch durch den Arrhenius Ansatz

$$k = BT^n \exp\left(-\frac{E}{R_m} T\right) \quad (3.4)$$

approximiert, mit den reaktionsspezifischen Konstanten  $B$  und  $n$  sowie der Aktivierungsenergie  $E$ , der allgemeinen Gaskonstante  $R_m$  und der Temperatur  $T$ .

Zur detaillierten Berechnung des Chemiemechanismus werden die einzelnen Stoßprozesse der Komponenten abgebildet. Beispielweise nehmen an der Methanverbrennung ca. 50 Spezies teil und ca. 320 Elementarreaktionen finden statt. Das bedeutet einen erheblichen numerischen Aufwand. Insbesondere für turbulente Systeme müssen Reduktionsstrategien angewendet werden, um die Vorgänge in der Flamme mit geringerem Aufwand zu approximieren. Die Reduktionsmechanismen nutzen die Tatsache, dass einige Reaktionen sehr geringe Zeitskalen im Vergleich mit den Zeitskalen der turbulenten Strömung aufweisen. Somit ergibt sich die Möglichkeit, eine Reduktion des Systems auf seine langsamsten Reaktionen vorzunehmen. Das kann mittels der Sensitivitätsanalyse erreicht werden (siehe Warnatz et al [132]). Mit der Annahme des „partiellen Gleichgewichts“ oder der „Stationarität der Radikale“ kann die Dimensionalität des Problems erniedrigt werden bei gleichzeitiger Erfassung der wesentlichen Reaktionsschritte. Die von Maas und Pope [69, 70] in diesem Kontext vorgeschlagene ILDM (*Intrinsic Low Dimensional Manifolds*) Methode, die das Reaktionssystem in einer vorgegebenen Anzahl von beschreibenden Variablen parametrisiert, wird in dieser Arbeit benutzt und die Details in Kapitel 3.4.3 dargestellt.

### 3.2 Chemie-Turbulenz Interaktion

Unter turbulenten Bedingungen wird der Mischungsprozess um ein Vielfaches gegenüber laminaren Flammen gesteigert. Die turbulenten Diffusionsvorgänge rufen ihrerseits kinetische Effekte in den chemischen Prozessen hervor. Die chemische Reaktion und die damit verbundene Volumenexpansion führt wiederum zu starken örtlichen und zeitlichen Kompositions- und Temperaturschwankungen. Damit besteht eine hochgradig nicht-lineare Abhängigkeit des chemischen Quellterms von den ihn determinierenden Größen. In Folge dieser Nicht-Linearität gilt:

$$\bar{\dot{\omega}} \neq \dot{\omega}(\bar{T}, \bar{Y}_\alpha) \quad (3.5)$$

bzw.

$$\bar{\rho} \neq \rho(\bar{T}, \bar{Y}_\alpha). \quad (3.6)$$

D.h., die Berechnung des in (2.32) bzw. in (2.40) eingehenden gemittelten chemischen Quellterms sowie der gemittelten Dichte kann nicht direkt aus den Mittelwerten der Temperatur bzw. aller anderen Spezies vorgenommen werden. Zur Lösung dieses Problems ist eine zusätzliche statistische Beschreibung notwendig.

Um die Kopplung zwischen Chemie und Turbulenz zu modellieren, kann die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF) eingeführt werden. Wenn die PDF bekannt

ist, können mittels der Integration der mit der PDF gewichteten Variablen  $\varphi$  alle statistische Momente eines beliebigen Skalars geliefert werden:

$$\bar{\varphi} = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi P(\varphi) d\varphi, \quad (3.7)$$

$$\overline{\varphi'^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} (\bar{\varphi} - \varphi)^2 P(\varphi) d\varphi \quad (3.8)$$

Zur Bestimmung der Form der PDF existieren verschiedenen Modelle.

Pope [97] schlägt zur Bestimmung der unbekannten PDF die Lösung einer Transportgleichung vor, die mittels Monte Carlo Methode erfolgt. Hierbei wird die PDF durch eine bestimmte Anzahl von stochastischen Partikeln repräsentiert, die ihrerseits bestimmte Eigenschaften zur Charakterisierung des Gemischzustandes besitzen. Vorteil des PDF-Verfahrens ist die geschlossene Quelltermformulierung. Nachteile sind fehlende Kenntnisse über die Beschreibung des Mischungsvorganges im Zustandsraum und erhebliche Rechenzeit und hoher Speicheraufwand.

Alternativ kann im Voraus ein Formverlauf der PDF angenommen werden, wie es mit der Methode der vorangenommenen Wahrscheinlichkeitsdichte-Funktion (*presumed-PDF*) gelingt. Die am meisten verbreitete Form der angenommenen PDF-Verteilung ist die zweiparametrische  $\beta$ -Funktion

$$\tilde{P}(\varphi) = \frac{\varphi^{\alpha-1} (1-\varphi)^{\beta-1}}{\int_0^1 \varphi^{\alpha-1} (1-\varphi)^{\beta-1} d\varphi} \quad (3.9)$$

Zur Bestimmung der Parameter

$$\alpha = \tilde{\varphi} \left( \frac{\tilde{\varphi}(1-\tilde{\varphi})}{\tilde{\varphi}''^2} - 1 \right) \quad \text{und} \quad \beta = (1-\tilde{\varphi}) \left( \frac{\tilde{\varphi}(1-\tilde{\varphi})}{\tilde{\varphi}''^2} - 1 \right) \quad (3.10)$$

müssen zusätzliche Gleichungen für die ersten beiden Momente (Mittelwert und Varianz) der die Chemie beschreibenden Variablen  $\tilde{\varphi}$  und  $\tilde{\varphi}''^2$  gelöst werden.

In einem mehrdimensionalen Zustandsraum ist die Definition angenommener Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion deutlich aufwendiger, weil keine parametrisierten Funktionen mehr bekannt sind. Die Zustandsraumvariablen des mehrdimensionalen Raums sind im allgemeinen statistisch miteinander korreliert. Durch eine Koordinatentransformation bzw. Normierung kann eine Entkopplung der Variablen durchgeführt werden [41]. Auf eine allgemein N-dimensionale JPDF (*Joint PDF*) angewendet bedeutet dies die Bestimmung über


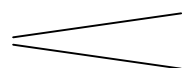
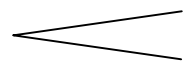

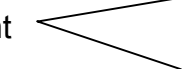
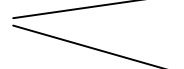
$$\tilde{P}(\varphi) \approx \tilde{P}(\varphi_1) \cdot \tilde{P}(\varphi_2) \cdot \dots \cdot \tilde{P}(\varphi_N). \quad (3.11)$$

Die Variablen  $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N$  müssen allerdings statistisch unabhängig voneinander sein. Die alternative Methode zur Konstruktion der PDF sind in Gutheil und Bockhorn [34], Kerstein [49] bzw. Goldin und Menon [32] zu finden.

#### 3.3 Modellierung turbulenter Verbrennung

Turbulente Flammen lassen sich grundsätzlich in vorgemischte und nichtvorgemischte (Diffusionsflammen) unterscheiden. Diese Unterscheidung hängt davon ab ob Brennstoff und Oxidator schon vor der Reaktion bis zur molekularen Ebene als Mischung vorliegen oder ob Mischung und Verbrennung gleichzeitig ablaufen. Die Verbrennungstypen und Anwendungsbereiche können folgendermaßen unterteilt werden (siehe Tabelle 3.1).

**Tabelle 3.1:** Beispiele für Verbrennungssysteme

Mischungstyp	Strömungstyp	Beispiele
Vorgemischt 	turbulent 	Otto-Motor Stationäre Gasturbine
	laminar 	Flache Flamme Bunsen-Flame
nicht-.vorgemischt (Diffusionsflammen) 	turbulent 	Kohlestaub-Verbrennung Flugzeug-Turbine Diesel-Motor
	laminar 	Holzfeuer Strahlungsbrenner Kerze

#### 3.4 Diffusionsflammen

In nicht vorgemischten Systemen wird durch konvektiven und diffusiven Transport zwischen Brennstoff und Oxidationsmittel ein zündfähiges Gemisch hergestellt. Dabei bildet sich eine Reaktionszone aus, in der Stoffumsatz und Wärmefreisetzung stattfinden. Die Position der Reaktionszone wird durch den lokal vorliegenden Gemischzustand zwischen Brennstoff und Oxidationsmittel definiert. Die Anwendungsbeispiele der Diffusionsverbrennung sind in der Tabelle 3.1 kurz zusammengefasst. Mit Diffusionsflammen lässt sich eine stabilere Verbrennung als mit Vormischflammen realisieren, da keine Vormischung mit einem bestimmten Luftfaktor erforderlich ist. Jedoch ist die Brenneffizienz von Diffusionsflammen

begrenzt, da die Mischungsrate die Geschwindigkeit der chemischen Reaktionen limitiert. Ein großer Nachteil dieses Verbrennungstyps ist, dass die thermische  $NO_x$ -Bildung wenig beeinflusst werden kann. Der Brennstoff kann zwar mit Stickstoff oder Abgasen verdünnt werden, jedoch wird die maximale Verbrennungstemperatur immer im Bereich stöchiometrischer Mischung, wo sich die größte  $NO_x$ -Bildungsrate befindet, erreicht. Der Komplexitätsgrad der Beschreibung einer solchen Verbrennung ist variabel. Es gibt relative aufwendige Verfahren wie die Flamelet-Methode [90, 91] und die ILDM-Methode [70] und auch einfache wie die Gleichgewichtsschemieannahme. Bei der Beschreibung der Modellierungsansätze wird zunächst mit der Definition des Mischungsgrades und des Shvab-Seldovich Formalismus begonnen.

Der Gemischzustand wird dabei über die Elementmassenbrüche beschrieben:

$$Z_i = \sum_{\alpha=1}^m \frac{M_i}{M_{\alpha}} a_{i\alpha} Y_{\alpha} \quad , \quad (3.12)$$

wobei  $\alpha = 1, \dots, m$  die beteiligten Spezies bezeichnet,  $Y_{\alpha}$  steht für die Speziesmassenbrüche,  $a_{i\alpha}$  ist die Komponenten-Matrix und enthält die in einer Spezies  $Y_{\alpha}$  vorkommende Anzahl der Atome des Elementes  $i$ . Da jedes Element in einer chemischen Reaktion in seiner Menge erhalten bleibt, spricht man bei dem Elementmassenbruch von einer Erhaltungsgröße. Die Erhaltungsgleichung für  $Z_i$ , analog zur Skalartransportgleichung (2.19) mit Ausnahme des Quellterms, lautet:

$$\frac{\partial \rho Z_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j Z_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho D \frac{\partial Z_i}{\partial x_j} \right) \quad . \quad (3.13)$$

Zur Definition einer den Mischungsgrad parametrisierenden Variablen wird die Normierung des Elementmassenbruchs  $Z_i$  durchgeführt, die sich auf den Ort ausschließlich vorliegenden Brennstoffs bzw. Oxidators bezieht. Geht man von einem einfachen Zweistoffsystem gemäß Abbildung 3.1 aus, in dem der Ort des reinen Brennstoffes mit dem Index „F“ bezeichnet ist und die den Oxidator enthaltende Umgebung mit dem Index „O“ bezeichnet ist, so kann hieraus der Mischungsgrad nach

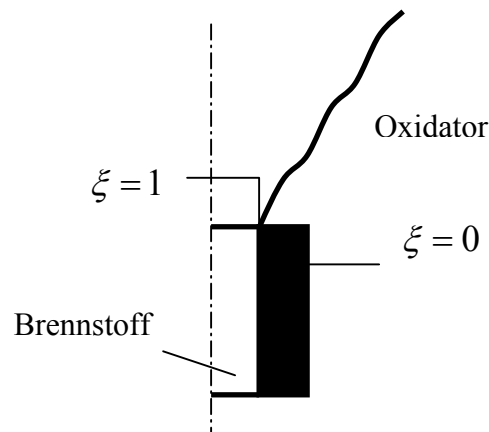
$$\xi = \frac{Z_i - Z_{i,O}}{Z_{i,F} - Z_{i,O}} \quad (3.14)$$

abgeleitet werden. Im Brennstoffstrahl nimmt  $\xi$  den Wert  $\xi = 1$ , im Oxidator  $\xi = 0$  an. Das gesamte System liegt im Intervall  $\xi \in [0,1]$ . Handelt es sich bei dem betrachteten System um ein Mehrstoffsystem, bei dem die Elemente nicht eindeutig einem Ursprung zuzuordnen sind, so ist Definition mehrerer Mischungsgrade sinnvoll, die auf unterschiedlichen Elementen basieren (als Beispiel sei ein  $H_2/O_2$ /Luft-System genannt, dessen Sauerstoff aus zwei unterschiedlichen Quellen stammen kann).

Wird die Definition (3.7) in die Gleichung (3.6) eingesetzt, bekommt man die Erhaltungsgleichung des Mischungsgrades:

$$\frac{\partial \rho \xi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j \xi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_j} \right). \quad (3.15)$$

Eine Besonderheit dieser Beschreibung für die Mischung ist, dass hieraus, unter bestimmten Voraussetzungen, eine Transportgleichung für die Enthalpie abgeleitet werden kann.



**Abbildung 3.1** Definition des Zweistoffsystems Brennstoff/Luft.

Zu diesen Voraussetzungen, die als Shvab-Seldovich Formalismus zusammengefasst sind, zählen die Annahme gleicher Stoffdiffusionskonstanten ( $D_{iM}=D$ ) und die Annahme der Äquivalenz von Wärme- und Stoffdiffusion, die über Lewis-Zahl,  $Le=1$  ausgedrückt werden kann:

$$Le = \frac{\lambda}{\rho c_p D}. \quad (3.16)$$

Da die durch turbulente Mischungsvorgänge hervorgerufene Diffusion viel größer ist als die molekulare Diffusion, kann diese Annahme als gerechtfertigt angesehen werden. Für die Enthalpie ergibt sich folgende Transportgleichung:

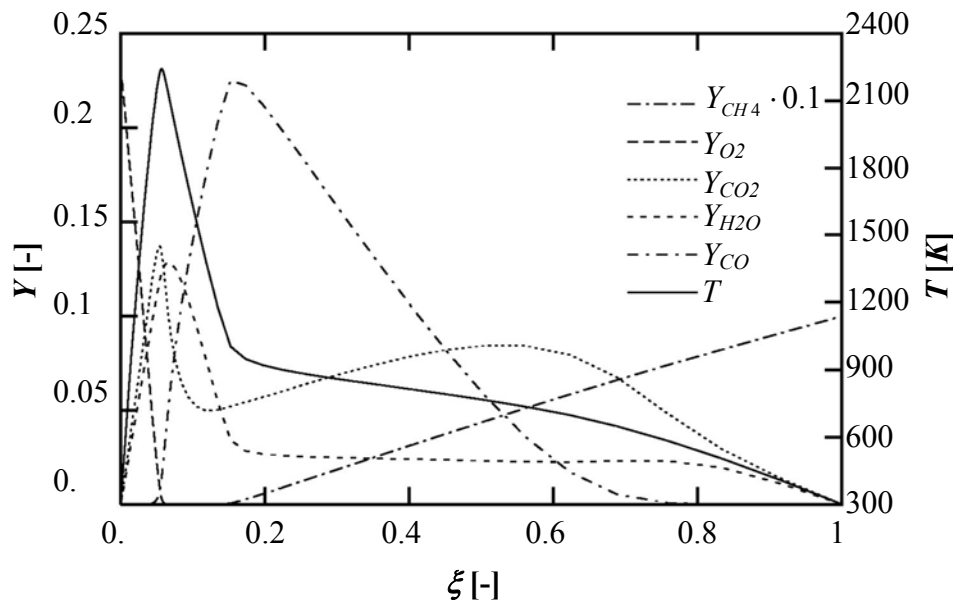
$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j h) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho D \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + \dot{q}_r. \quad (3.17)$$

Zur Bestimmung des Strahlungsquellterms  $\dot{q}_r$  stehen Modelle unterschiedlichen Komplexitätsgrades zu Verfügung, die im Kapitel 4.1 diskutiert werden.



### 3.4.1 Das Modell des chemischen Gleichgewichts

Dieses Modell basiert auf der Annahme thermochemischen Gleichgewichts aller beteiligter Komponenten. Dies setzt eine unendlich schnelle Reaktion voraus. Das chemische Gleichgewicht bestimmt sich durch die Minimierung der Freien Gibbsschen Energie des Systems nur auf der Basis Elementzusammensetzung, das heißt der Mischungsbasis. Mit Kenntnis des vorliegenden Mischungsgrades lassen sich alle Spezieskonzentrationen sowie die Temperatur und die Dichte bestimmen. Dieser Zusammenhang für ein  $\text{CH}_4$ -Luft Gemisch ist in der Abbildung 3.2 gezeigt. Der stöchiometrische Mischungsgrad  $\xi_{st}$  beschreibt den Zustand, bei dem Brennstoff und Oxidator vollständig reagieren.



**Abbildung 3.2:** Darstellung von Konzentrations- und Temperaturverlauf im chemischen Gleichgewicht.

Im turbulenten Fall ist der Mischungsgrad statistischen Schwankungen unterworfen. Damit folgt die Gleichung für den mittleren Mischungsgrad:

$$\frac{\partial \rho \tilde{\xi}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j \tilde{\xi}) = - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{\xi} \widetilde{u_j''}) \quad (3.18)$$

Die nicht geschlossenen Mischungsgrad-Geschwindigkeitskorrelationen werden nach (2.44) oder (2.52) approximiert.

Die Kopplung zum turbulenten Zustand wird mit dem *presumed-β*-PDF Ansatz über die PDF Integration realisiert:

$$\tilde{\varphi} = \int_0^1 \varphi(\xi) \tilde{P}(\xi) d\xi. \quad (3.19)$$

Infolgedessen muss die Gleichung für die Varianz des Mischungsgrades gelöst werden. Die Gleichung für die Varianz lautet:

$$\frac{\partial \rho \tilde{\xi}''^2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j \tilde{\xi}''^2) = - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho \tilde{\xi}''^2 u_j''}) - 2 \overline{\rho u_j'' \tilde{\xi}''} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_j} - 2 D \overline{\frac{\partial \xi''}{\partial x_j} \frac{\partial \xi''}{\partial x_j}}. \quad (3.20)$$

Die unbekannten skalaren Flüsse werden mit Hilfe der turbulenten Viskosität  $\nu_t$  wie in (2.44, 2.52) modelliert. Die Modellierung der Skalare Dissipationsrate  $2D \frac{\partial \xi''}{\partial x_j} \frac{\partial \xi''}{\partial x_j}$  wird über das inverse integrale Zeitmass vorgenommen:

$$2D \frac{\partial \xi''}{\partial x_j} \frac{\partial \xi''}{\partial x_j} = C_\chi \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \tilde{\xi}''^2 \quad \text{mit } C_\chi = 2.0. \quad (3.21)$$

Das Gleichgewichtsmodell liefert zuverlässige Vorhersagen bzgl. Hauptspezies und der Temperatur, ist allerdings nicht in der Lage kinetisch bedingte Spezies, wie CO- und OH-Konzentrationen, quantitativ zufriedenstellend abzubilden. Hierbei kann nur ein Modell, das kinetische Effekte einbezieht, z.B. ILDM-Methode, weiterhelfen.

#### 3.4.2 Das Flamelet-Modell

Betrachtet man eine turbulente Diffusionsflamme, so postuliert das Flamelet-Modell [77, 78] laminare Diffusionsflammenfronten an der Stelle momentaner stöchiometrischer Zusammensetzung. Voraussetzung dabei ist, dass die Flammenfrontdicke  $l_F$  kleiner als das kleinste turbulente Längemaß ist. Die Flammenfront kann dann als eindimensionales Gebilde unter dem Einfluss der durch Geschwindigkeitsgradienten verursachten Streckung im turbulenten Strömungsfeld betrachtet werden, so dass die ursprünglich zwei- oder dreidimensionale Kopplung von Strömung und Chemie nun eindimensional behandelt werden kann. Die Struktur der Flamelets wird im Mischungsgradraum dargestellt. Alle skalaren Größen werden in Abhängigkeit von dem Mischungsgrad  $\xi$  beschrieben. Aus der Beobachtung, dass mit steigender Mischungsintensität die Abweichung vom Zustand des chemischen Gleichgewichts zunimmt, wird neben dem Mischungsgrad als weiterer Parameter zur Beschreibung der Chemie die skalare Dissipationsrate

$$\chi = 2D \left( \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right)^2 \quad \text{herangezogen.}$$

Eine Bibliothek von Flammenstrukturen bei verschiedenen Streckungen (beschrieben durch den Parameter  $\chi$ ) kann die Struktur der Flamelets und ihr Verhalten im turbulenten Strömungsfeld beschreiben.

In Flammen ist der Geschwindigkeitsgradient (auch *strain rate* genannt) ein charakteristisches Zeitmaß für die Streckung. Obwohl in Flameletgleichungen die skalare Dissipationsrate auftritt, wird als Streckungsparameter die *strain rate* bevorzugt, da sie besser in der Lage ist, das Verlöschen einer Flamme zu

charakterisieren. Diese wird aus dem inversen integralen Zeitmaß über die Beziehung

$$\bar{a} \sim \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \quad (3.22)$$

berechnet. Je höher die *strain rate* ist, umso mehr lokales Verlöschen tritt auf, die Flammentemperatur in der Reaktionszone nimmt ab. Überschreitet  $\bar{a}$  einen kritischen Wert, können Brennstoff und Oxidator nicht mehr schnell genug in die Reaktionszone transportiert werden, bzw. haben nicht genug Zeit für eine Reaktion, die Flamme erlischt.

Die Kopplung zu einem turbulenten Zustand wird mit dem *presumed*-PDF Ansatz unter Voraussetzung statistischer Unabhängigkeit zwischen  $\xi$  und  $\bar{a}$  realisiert:

$$\tilde{\varphi} = \int_0^1 \int_0^\infty \varphi(\xi, \bar{a}) \tilde{P}(\bar{a}) \tilde{P}(\xi) d\bar{a} d\xi, \quad (3.23)$$

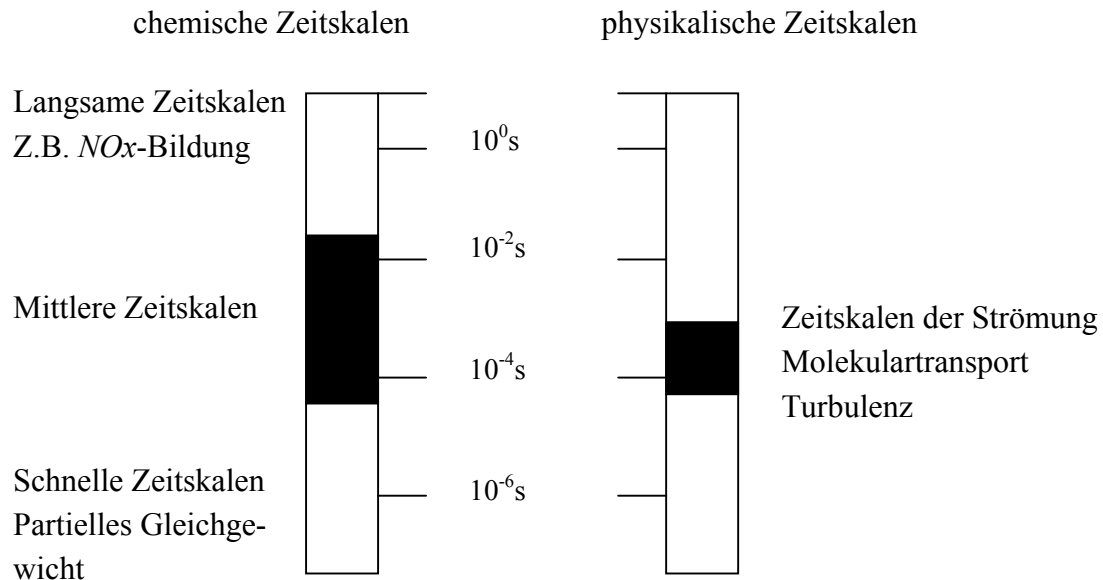
wobei für den Mischungsgrad wurde  $\beta$ -PDF Ansatz benutzt und  $\bar{a}$  wurde mit  $\delta$ -Dirac-Funktion beschrieben, was bedeutet, dass die Varianz von  $\bar{a}$  konstant angenommen werden.

Das Flamelet-Modell erlaubt die chemischen Vorgänge innerhalb einer laminaren Reaktionszone zu beschreiben. Im *post flame* Bereich ist die vollständige Definition des thermochemischen Zustandes jedoch problematisch, da hier keine klare Reaktionszone erkennbar ist und die Voraussetzung quasi-laminarer Strukturen nicht erfüllt ist.

#### 3.4.3 Das ILDM Modell

Die beiden oben dargestellten Modelle haben den Nachteil, dass sie bei langsam ablaufenden Reaktionen relativ ungenaue Vorhersagen über die Entstehung und Umsetzung von Nebenprodukten oder Schadstoffen liefern, da kinetische Effekte nicht berücksichtigt sind. Durch die Methode der *Intrinsic Low Dimensional Manifolds* (ILDM), die von Maas und Pope [71] und Warnatz [132] entwickelt worden ist, können kinetische Effekte zuverlässig beschrieben werden. Bei der ILDM-Methode werden die schnellen Reaktionen als nebensächlich im Vergleich mit den physikalischen Skalen betrachtet, die den Molekular- und Turbulenttransport beschreiben, und daher von den langsamen Reaktionen entkoppelt (siehe Abb 3.3). Mathematisch gesehen wird durch die Beschreibung des Systems mit wenigen langsamen Reaktionen die Steifheit des Differentialgleichungssystems reduziert. Die Zeitskalen der beteiligten Reaktionen können durch eine Eigenwertanalyse des vollständigen Reaktionsmechanismus identifiziert werden. Da die chemische Reaktionskinetik ein stark nichtlineares Differentialgleichungssystem darstellt, muss eine Taylorreihenentwicklung für eine lokale Zusammensetzung angewendet werden, so dass sich ein linearisiertes Gleichungssystem ergibt. Die Eigenwerte der hierbei entstehenden Jakobi-Matrix liegen dann vor und informieren über die lokale Dynamik der chemischen Kinetik.

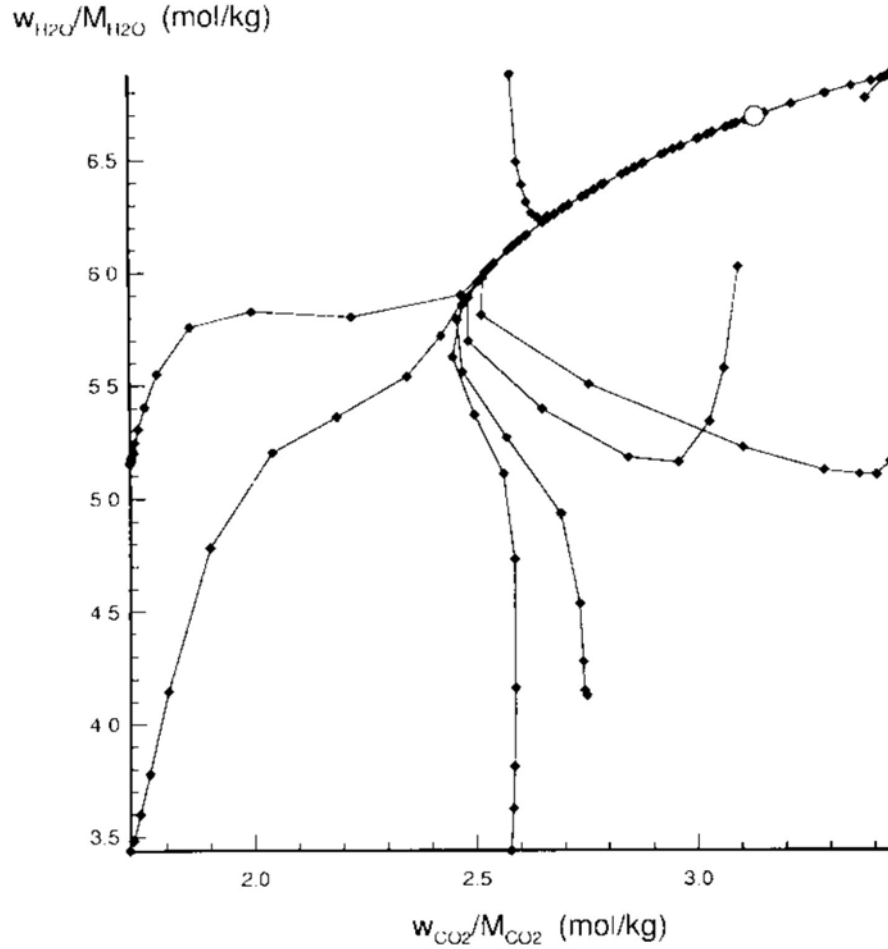
Eine Reaktion bewegt sich entlang der niedrigdimensionalen Mannigfaltigkeiten auf Trajektorien auf einen Gleichgewichtspunkt hin. Die Bewegung hin zur Mannigfaltigkeit findet sehr schnell statt. Die Richtung der Bewegung auf der



**Abbildung 3.3:** Vergleich der chemischen und physikalischen Zeitskalen.

Mannigfaltigkeit wird durch die aus der Eigenwertanalyse hervorgegangenen Eigenvektoren beschrieben. In dieser Arbeit wurde ein mittels ILDM-Methode reduzierter  $CH_4$  Mechanismus nach Schmidt et.al [110] verwendet. Der Zustand auf der zweidimensionalen Mannigfaltigkeit wird mittels Mischungsgrad und zwei Reaktionsfortschrittsvariablen (Massenbrüche von Kohlendioxid und Wasser) definiert. Auf der Abbildung 3.4 ist die zweidimensionale Mannigfaltigkeit für einen gegebenen Mischungszustand dargestellt. Alle Trajektorien, die verschiedenen Anfangszuständen entsprechen, laufen auf nur einen Pfad zu, der dem reduzierten Reaktionssystem entspricht, welches die langsamen Reaktionen berücksichtigt. Nach hinreichend langer Zeit wird der Gleichgewichtszustand erreicht. Die Anwendung des ILDM-Modells auf turbulente Systeme im Rahmen der RANS-Modellierung setzt die Lösung der gemittelten Transportgleichungen für den Mischungsgrad sowie die Reaktionsfortschrittsvariablen voraus, durch die das System parametrisiert ist. Zur Bestimmung der Quellterme und der gemittelten Dichte wurde in dieser Arbeit das von Landenfeld [60] entwickelte und auf einem *presumed*-PDF-Ansatz basierende Kopplungsmodell verwendet.

Zur Definition einer mehrdimensionalen *presumed*-PDF wird die Normierung der lokal vorliegenden Reaktionsfortschrittsvariablen  $Y_\alpha$  auf ihren nur vom Mischungsgrad abhängigen Gleichgewichtswert  $Y_{\alpha,eq}(\xi)$  gemäß



**Abbildung 3.4:** Trajektorien der  $\text{CH}_4$ -Chemie im Zustandsraum (aus Schmidt et. al. [110])

$$Y_{\text{CO}_2}^* = \frac{Y_{\text{CO}_2}}{Y_{\text{CO}_2,eq}(\xi)} \quad \text{und} \quad Y_{\text{H}_2\text{O}}^* = \frac{Y_{\text{H}_2\text{O}}}{Y_{\text{H}_2\text{O},eq}(\xi)} \quad (3.24)$$

eingeführt. Dadurch begrenzt sich der Definitionsbereich der Reaktionsfortschrittsvariablen auf das Intervall  $[0,1]$ , was die Anwendung von  $\beta$ -Funktionen als Formannahme für die eindimensionalen PDFs erleichtert. Mit der Annahme statistischer Unabhängigkeit zwischen den normierten Variablen  $Y_\alpha^*$  und  $\xi$  kann die Konstruktion der dreidimensionalen *Joint* PDF  $\tilde{P}(\xi, Y_{\text{CO}_2}, Y_{\text{H}_2\text{O}})$  aus drei eindimensionalen PDFs entsprechend (3.11) vorgenommen werden. Somit ergibt sich die mehrdimensionale PDF-Integration zu

$$\tilde{\varphi} = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \varphi(\xi, Y_{\text{CO}_2}^*, Y_{\text{H}_2\text{O}}^*) \tilde{P}(\xi) \tilde{P}(Y_{\text{CO}_2}^*) \tilde{P}(Y_{\text{H}_2\text{O}}^*) d\xi dY_{\text{CO}_2}^* dY_{\text{H}_2\text{O}}^* . \quad (3.25)$$

Auf Grund der Verwendung eindimensionaler  $\beta$ -PDFs hängt die gemittelte Größe  $\tilde{\varphi}$  damit nur von Mittelwert und Varianz der beschreibenden Parameter ab. Die Transportgleichungen müssen für die normierten Reaktionsfortschrittsvariablen

umformuliert werden. Nach Landefeld [59] ergibt sich für die normierten Reaktionsfortschrittsvariablen:

$$\tilde{Y}_{CO_2}^* \approx \left( \frac{1}{\tilde{Y}_{\alpha,eq}} \right) \tilde{Y}_{\alpha} \text{ und} \quad (3.26)$$

$$Y_{\alpha}^{*''2} \approx \left( \frac{1}{\tilde{Y}_{\alpha,eq}} \right)^2 \left( \tilde{Y}_{\alpha,eq}''2 + \tilde{Y}_{\alpha}''2 - 2\sqrt{\tilde{Y}_{\alpha,eq}''2} \sqrt{\tilde{Y}_{\alpha}''2} \right). \quad (3.27)$$

Die Normierungsfaktoren  $\left( \frac{1}{\tilde{Y}_{\alpha,eq}} \right)$ ,  $\left( \frac{1}{\tilde{Y}_{\alpha,eq}} \right)^2$ ,  $\tilde{Y}_{\alpha,eq}''2$  werden über (3.25) berechnet.

Der gemittelte thermochemische Zustand des Reaktionssystems kann durch die Lösung der modellierten Transportgleichungen von Mittelwert und Varianz des Mischungsgrades und Reaktionsfortschrittsvariablen bestimmt werden:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_{\alpha}) + \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_{\alpha}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \bar{\rho} \left( \nu + \frac{\nu_t}{\sigma_{\varphi 1}} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_{\alpha}}{\partial x_j} \right] + \bar{\dot{\omega}}_{\alpha} \quad (3.28)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_{\alpha}''2) + \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_{\alpha}''2) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \bar{\rho} \left( \nu + \frac{\nu_t}{\sigma_{\varphi 1}} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_{\alpha}''2}{\partial x_j} \right] + 2\bar{\rho} \frac{\nu_t}{\sigma_{\varphi 1}} \left( \frac{\partial \tilde{Y}_{\alpha}}{\partial x_j} \right) \\ &\quad - 2\bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \tilde{Y}_{\alpha}''2 + 2\overline{\tilde{Y}_{\alpha} \dot{\omega}_{\alpha}} \end{aligned} \quad (3.29)$$

Die in (3.28) und (3.29) eingehenden Quellterme werden über (3.25) berechnet mit

$$\bar{\dot{\omega}}_{\alpha} = \bar{\rho} \tilde{S}_{\alpha} \quad \text{und} \quad \overline{Y_{\alpha}'' \dot{\omega}_{\alpha}'} = \bar{\rho} (\overline{Y_{\alpha} S_{\alpha}} - \tilde{Y}_{\alpha} \tilde{S}_{\alpha}). \quad (3.30)$$

Die Integration über (3.25) für alle benötigten Variablen wird in einem Vorlaufprogramm durchgeführt, dass eine sechsdimensionale (im nicht-adiabaten Fall siebendimensionale), alle gemittelten Größen enthaltende, Tabelle generiert, auf die der CFD-Code zugreift.

### 3.5 Erweiterung für die Systeme mit Wärmeabgabe

Wird der Fall adiabater Bedingungen verlassen, soll die Enthalpiegleichung mit dem Strahlungsquellterm mitberücksichtigt werden. Die Enthalpiegleichung in ihrer gemittelten Form lautet:

$$\frac{\partial \rho \tilde{h}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j \tilde{h}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \bar{\rho} D_t \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \right) + \bar{q}_r \quad (3.31)$$

Zu beachten sind dabei zwei Grenzwerte für die Enthalpie. Die Enthalpie ist nach unten offensichtlich durch die Enthalpie des Gemisches bei minimaler Systemtemperatur beschränkt. Diese Temperatur kann je nach Systemkonfiguration die Wandtemperatur oder die Temperatur eines eintretenden Stoffes sein. Die Obergrenze ist durch die adiabate Gemischenthalpie gegeben. Es ist zwar grundsätzlich denkbar, dass diese Obergrenze durch Strahlungsabsorption oder Wärmeleitung von heißen Wänden überschritten wird, allerdings spielt dieser Fall in Verbrennungssystemen mit gekühlten Wänden praktisch keine Rolle.

In das Reaktionsmodell muss eine zweite unabhängige Variable (Strahlungsgrad) Eingang finden, die unterschiedliche Enthalpieniveaus charakterisiert. Der Strahlungsgrad ist wie folgt definiert

$$g = \frac{\tilde{h} - h_{\max}(\xi)}{h_{\min}(\xi) - h_{\max}(\xi)}, \quad (3.32)$$

wobei  $h_{\max}$  die adiabate Gemischenthalpie darstellt und  $h_{\min}$  die Enthalpie des Gemisches bei minimaler Systemtemperatur.

Der Strahlungsgrad variiert unabhängig vom Mischungsgrad zwischen Null und Eins. Strahlungsgrad  $g=0$ , entspricht adiabater Mischung, bei Strahlungsgrad  $g=1$  besitzt das Gemisch die minimale Systemtemperatur. Die Kopplung zu einem turbulenten Zustand wird mit dem *presumed*-PDF Ansatz realisiert unter Voraussetzung statistischer Unabhängigkeit zwischen  $\xi$  und  $g$ . Die Integration über den Mischungsgrad  $\xi$  und Strahlungsgrad  $g$  für die Größen, die den thermochemischen Zustand charakterisieren

$$\tilde{\varphi} = \int_0^1 \int_0^1 \varphi(\xi, g) \tilde{P}(g) \tilde{P}(\xi) dg d\xi, \quad (3.33)$$

wobei für den Mischungsgrad wurde  $\beta$ -PDF Ansatz benutzt und  $g$  wurde mit  $\delta$ -Dirac-Funktion beschrieben, was bedeutet, dass die Varianz von  $g$  konstant angenommen werden.

Analog zu (3.33) gilt für die Variable  $\tilde{\varphi}$  im Fall der ILDM-Chemie:

$$\tilde{\varphi} = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \varphi(\xi, Y_{CO_2}^*, Y_{H_2O}^*, g) \tilde{P}(g) \tilde{P}(\xi) \tilde{P}(Y_{CO_2}^*) \tilde{P}(Y_{H_2O}^*) dg d\xi dY_{CO_2}^* dY_{H_2O}^* \quad (3.34)$$

### 3.6 Die Vormischverbrennung

Im Gegensatz zu den in Kapitel 3.2 diskutierten Diffusionsflammen, bezeichnet man mit Vormischverbrennung den Vorgang, wenn durch Zündung eines auf molekularer Ebene gemischten Brennstoff/Luftgemisches eine Flammenausbreitung initiiert wird.

Dazu muss das Gemisch innerhalb der Flammbarkeitsgrenzen vorliegen. Zuerst werden die Größe zur Charakterisierung und Einordnung der Vormischflammen vorgestellt und die Methoden zur Modellierung der vorgemischten Flammen werden erläutert.

#### 3.6.1 Flammenstruktur und laminare Längenskalen

Die laminare Brenngeschwindigkeit  $\vec{s}_L$  ist eine wichtige Größe zur Charakterisierung und Einordnung von Flammen. Mit dieser Geschwindigkeit bewegt sich eine ebene Flammenfront in einem brennfähigen Gemisch fort.

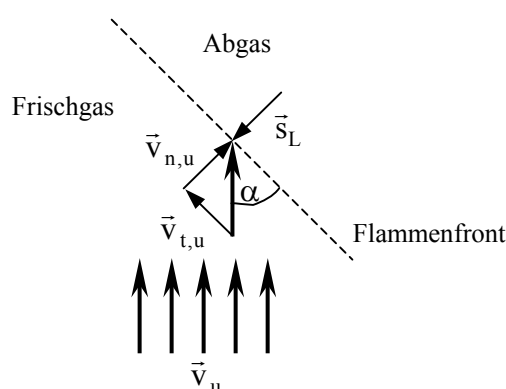
Der Vektor  $\vec{s}_L$  der laminaren Brenngeschwindigkeit steht immer senkrecht zur Flammenfront. Die laminare Brenngeschwindigkeit hängt sowohl von der Zusammensetzung des Gemisches als auch von dem Druck und von der Temperatur ab. So nimmt sie mit steigendem Druck ab und erhöht sich mit wachsender Temperatur.

Die laminare Flammengeschwindigkeit einer stationären Flamme  $\vec{v}_f$  ergibt sich aus der vektoriellen Addition der laminaren Brenngeschwindigkeit sowie der Strömungsgeschwindigkeit  $\vec{v}_u$  wie folgt (siehe Abb.3.5):

$$\vec{v}_f = \vec{s}_L + \vec{v}_u \quad (3.35)$$

Damit erhält man für den Betrag von  $\vec{s}_L$

$$s_L = v_{n,u} = v_u \sin \alpha \quad (3.36)$$



**Abbildung 3.5:** Zusammenhang zwischen Brenn- und Flammengeschwindigkeit

Für laminare Vormischflammen kann die Brenngeschwindigkeit sowohl experimentell als auch numerisch bestimmt werden. Die Vorhersage der turbulenten Brenngeschwindigkeit stellt die Problematik bei der Modellierung turbulenter Vormischflammen dar, da, abhängig von den Turbulenzstruktur, die



Brenngeschwindigkeit auf ein Vielfaches ihres laminaren Wertes ansteigen kann. Die Simulation von Ausbreitungseffekten hängt wesentlich von der turbulenten Brenngeschwindigkeit ab.

Zur Illustration der Längenskalen in der laminaren Flammenstruktur sind in Abbildung 3.6 neben dem Temperaturverlauf die definierten Zonen nach Peters [89] dargestellt, denen jeweils charakteristische Längen zugewiesen werden.

Die Vorwärmzone kann durch die laminare Flammendicke  $l_F$  charakterisiert werden.

$$l_F = \frac{\left(\frac{\lambda}{c_p}\right)_{T_0}}{\rho_u s_L} \quad (3.37)$$

Die Temperatur  $T_0$  stellt den Bezugswert für die Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$  und die spezifische Wärmekapazität  $c_p$  dar. Die Dichte des unverbrannten Brenngasgemisches  $\rho_u$  wird verwendet. Die in dieser Gleichung implizit enthaltene Flammenzeit  $t_F = \frac{l_F}{s_L}$  entspricht der charakteristischen chemischen Zeit  $t_c$  einer

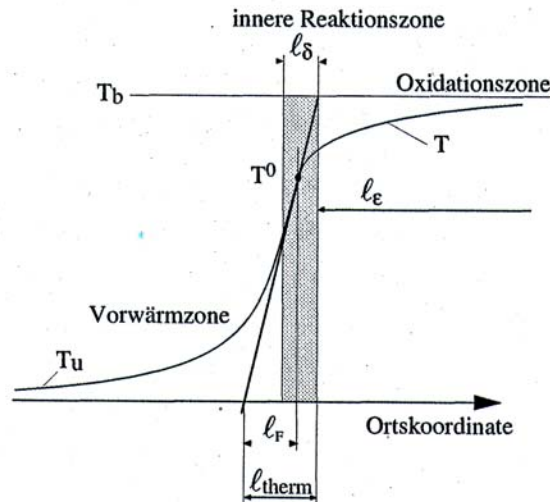
laminaren Flamme. Die laminare Brenngeschwindigkeit  $s_L$  kann dann mit einer Dimensionsanalyse zu

$$s_L = \sqrt{\frac{\lambda}{\rho c_p t_c}} \quad (3.38)$$

definiert werden. Hier sind die chemische Zeit und die laminare Brenngeschwindigkeit aufgrund des Wärmetransportes in der Vorwärmzone voneinander abhängig.

Eine laminare Flammendicke kann aufgrund von geometrischen Überlegungen über verschiedene Definitionen gewonnen werden. In der Literatur [1] wurden sieben Definitionen für die laminare Flammendicke eingeführt, davon sind wiederum zwei in Abbildung 3.6 dargestellt. Die Länge  $l_F$  entspricht dort dem Abstand zwischen dem Ort des maximalen Temperaturgradienten und dem Schnittpunkt der Tangente am maximalen Temperaturgradienten mit der waagrechten  $T=T_u$ . Die Länge  $l_{therm}$  entspricht dem Abstand der Schnittpunkte der Tangente am maximalen Temperaturgradienten mit  $T_u$  und  $T_b$ . Für die thermische Flammendicke gilt:

$$l_{therm} = \frac{T_b - T_u}{\left(\frac{dT}{dx}\right)_{\max}} \quad (3.39)$$



**Abbildung 3.6:** Schematisch dargestellter Temperaturverlauf und definierte Zonen in einer vorgemischten Flamme nach [79]

Die Dicke der inneren Reaktionszone ist als  $l_\delta = \delta l_F$  definiert, wobei  $\delta \approx 0.1$  gesetzt wird. Die Dicke der Oxidationszone beträgt  $l_\epsilon = \epsilon l_F$ . Der entsprechende Parameter liegt für Methanflammen bei  $\epsilon \approx 0.3$ .

#### 3.6.2 Die Interaktion von Turbulenz und Flammenausbreitung

Im Rahmen der ersten theoretischen Beschreibung für die turbulente vorgemischte Verbrennung formulierte Damköhler auf der Grundlage optischer Experimente zwei Gebiete der Interaktion zwischen Strömungsfeld und Flammenfront [23]. Für die grobballige Turbulenz nahm er an, dass die Interaktion zwischen Turbulenz und Verbrennung rein kinematisch ist, d.h. unabhängig von Längenskalen. Die charakteristischen Wirbel der Strömung sind in diesem Regime wesentlich größer als die laminare Flammendicke. Für die Beschreibung der Verbrennung bei kleinskaliger (feinballiger) Turbulenz, d.h. bei hohen Turbulenzgraden, gab es in der Wissenschaft jedoch kontroverse Diskussionen. In diesem Regime ist die Kolmogorovlänge, die das kleinste turbulente Längenmaß darstellt, kleiner als die laminare Flammendicke  $l_F$ . Bei der phänomenologischen Betrachtung ging man davon aus, dass keine dünnen Flammenstrukturen mehr existieren. Dabei wurde jedoch übersehen, dass die Struktur turbulenter Flammen nicht durch eine einzige Flammenzone, die mit der laminaren Flammendicke  $l_F$ , beschrieben werden kann. Zur Quantifizierung der Interaktion zwischen Turbulenz und Flammenausbreitung wird angenommen, dass die Diffusivitäten der Wärme  $D$  und der Strömung  $\nu$  gleich sind. Es ergibt sich eine Schmidt-Zahl  $Sc = \nu/D = 1$ . Die laminare Flammendicke  $l_F$  und die zugehörige charakteristische Flammenzeit  $t_F$  lassen sich vereinfachen zu:

$$l_F = \frac{D}{s_L} \quad , \quad t_F = \frac{D}{s_L^2} \quad (3.40)$$

Die turbulente Reynoldszahl kann nun mit dem turbulenten Längenmaß  $l_t$  als Referenzlänge und  $u'$  als Referenzgeschwindigkeit mit den Flammeneigenschaften über  $v_{ref}=s_L l_F$  ausgedrückt werden. Es gilt:

$$Re_t = \frac{u' l_t}{s_L l_F} \quad (3.41)$$

Für die turbulente Reynoldszahl lassen sich zwei Gebiete abgrenzen. Eine Flamme ist laminar falls  $Re_t < 1$  gilt, sie ist turbulent für  $Re_t > 1$ . Eine weitere wichtige Kenngröße stellt die Damköhler-Zahl dar, die über das Verhältnis der chemischen Zeitskala  $t_c = t_F$  zu den turbulenten Zeitskalen  $\tau$  definiert ist. Mit dem integralen Längenmaß ergibt sich turbulente Damköhler-Zahl zu

$$Da_t = \frac{\tau}{t_F} = \frac{s_L l_t}{u' l_F} \quad (3.42)$$

Die chemischen und turbulenten Größen treten nach Peters [92] jedoch nur bei kleinen Größenordnungen in Interaktion, sodass die Damköhler-Zahl definiert mit dem integralen Längenmaß keinen direkten physikalischen Effekt beschreibt. Die turbulente Karlovitz-Zahl  $Ka$  beschreibt die Interaktion der Strömung anhand der kleinen Zeitskalen, der Kolmogorov-Zeit  $t_\eta$ , mit dem charakteristischen Zeitmaß der Flamme  $t_F$  und ist wie folgt definiert

$$Ka = Da_\eta^{-1} = \frac{t_F}{t_\eta} = \frac{l_F^2}{\eta^2} = \frac{v_\eta^2}{s_L^2} \quad (3.43)$$

Die Abhängigkeit der Karlovitz-Zahl von den Verhältnissen  $u'/s_L$  und  $l_t/l_F$ , die ja zur Beschreibung der Zusammenhänge im laminaren Fall gelten, sieht dann mit Hilfe von (2.2), (2.3) und (3.43) wie folgt aus:

$$\frac{u'}{s_L} = \frac{v l_t^{1/3}}{\eta^{4/3} s_L^0} = \frac{l_F l_t^{1/3}}{\eta^{4/3}} = \frac{l_F^{4/3}}{\eta^{4/3}} \left( \frac{l_t}{l_F} \right)^{1/3} = Ka^{2/3} \left( \frac{l_t}{l_F} \right)^{1/3} \quad (3.44)$$

bzw.

$$Ka = \left( \frac{u'}{s_L} \right)^{\frac{3}{2}} \left( \frac{l_t}{l_F} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (3.45)$$

Eine weitere Kennziffer zur Beurteilung der Verhältnisse bei der turbulenten Vormischverbrennung ist die Zahl  $Ka_\delta$ , die über die Reaktionszonendicke  $l_\delta$  anstatt der laminaren Flammendicke  $l_F$  definiert ist zu

$$Ka_\delta = \frac{l_\delta^2}{\eta^2} = \delta^2 Ka \quad (3.46)$$

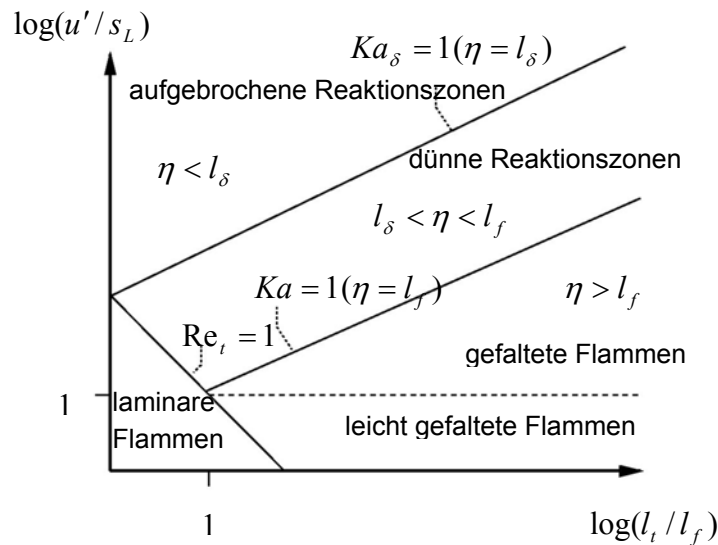
Mit diesen Kennzahlen können nun im Phasendiagramm für vorgemischte Verbrennung nach Peters [92] 5 Bereiche identifiziert werden. In diesem Diagramm, in Abbildung 3.7 dargestellt, wird das Verhältnis der Turbulenzintensität zur laminaren Brenngeschwindigkeit  $u'/s_L$  über dem Verhältnis des integralen, turbulenten Längenmaßes zur laminaren Flammendicke  $l_t/l_F$  logarithmisch dargestellt. Fünf Bereiche werden in diesem Diagramm durch konstante Werte der turbulenten Reynoldszahl  $Re_t=1$  sowie der Karlovitz-Zahlen  $Ka=1$  und  $Ka_\delta=1$  begrenzt:

- laminare Flammen ( $Re_t < 1$ )
- leicht gewellte Flammen ( $Re_t > 1, Ka < 1, u'/s_L < 1$ )
- gefaltete Flammen ( $Re_t > 1, Ka < 1, u'/s_L > 1$ )
- dünne Reaktionszonen ( $Re_t > 1, Ka > 1, u'/s_L > 1$ )
- aufgebrochene Reaktionszonen ( $Re_t > 1, Ka_\delta > 1, u'/s_L > 1$ )

Als Flamelet-Regime werden im Allgemeinen die Bereiche der leicht gewellten und gefalteten Flammen bezeichnet. Im Bereich der gewellten Flammen ist  $u' < s_L$ , d.h. die Flammenausbreitung wird von der laminaren Brenngeschwindigkeit dominiert. Hier kann  $u'$  als Umdrehungsgeschwindigkeit der großen turbulenten Wirbel interpretiert werden, diese sind nicht in der Lage, die Flammenfront zu falten. Mit steigender Turbulenzintensität erhöht sich auch die Geschwindigkeit der großen Wirbel. Diese relativ schnellen Wirbel rollen und falten nun die Flammenfront. Die laminare Flammendicke ist in diesem Bereich kleiner als alle turbulenten Längenmaße, so daß die Flamme im Vergleich mit den turbulenten Strukturen als dünn angesehen werden kann. Turbulente Flammen können somit durch eindimensionale laminare Flamelets beschrieben werden, deren Verhalten durch Flammenstreckung beeinflusst wird [91]. Steigt der Turbulenzgrad über die Linie des Klimov-Williams Kriterium ( $Ka=1$ ), so besitzen auch kleinere Wirbel genug Energie, um Wärme aus der Vorwärmzone hinaus zu transportieren.

Die dünne Reaktionszone mit der charakteristischen Dicke  $l_\delta$  bleibt jedoch ungestört. Daher wird dieser Bereich mit dem Begriff der dünnen Reaktionszonen bezeichnet. Von aufgebrochenen Reaktionszonen hingegen spricht man, wenn mit weiter steigender Turbulenzintensität über die Linie  $Ka_\delta=1$  die kleinsten Wirbelelemente in der Lage sind, in die dünne Reaktionszone einzudringen. Dadurch wird die

Flammenfront aufgebrochen und es existiert keine zusammenhängende Reaktionsfront mehr.



**Abbildung 3.7:** Phasendiagramm vorgemischter Verbrennung

#### 3.6.3 Modellierung turbulenter Vormischverbrennung mit G-Gleichung

Einen Überblick über die in der Literatur beschriebenen Modelle zur Beschreibung der turbulenten Vormischflammen geben u.a. Peters [89], Pope [98], Veynante & Poinot [96]. Das *Eddy-Break Up* Modell (*EBU*) von Spalding [121] verwendet die Favre-gemittelte Transportgleichung für die Konzentration des Brennstoffes für magere Gemische bzw. des Oxidators für fette Gemische. Das *EBU*-Modell ist wegen der einfachen Schließung der Transportgleichungen attraktiv. Der Nachteil des Modells ist jedoch, dass die Modellparameter je nach Anwendung angepasst werden müssen. Das Flammenflächendichte-Modell von Marble & Broadwell [74], verwendet als die Flammenflächendichte ein Verhältnis zwischen Flammenfläche und Volumen. Als Flammenfläche wird dabei die Oberfläche der Flamme in einem Volumen bezeichnet. Die Untersuchungen von Duclos et al. [24] zeigen jedoch unbefriedigende Ergebnisse. Entwicklungsbedarf besteht in der Berücksichtigung der counter-gradient Diffusion und molekularen Mechanismen. In Rahmen des *BML*-Modells (siehe Bray et al. [10, 11], Libby und Williams [67]) wird eine Transportgleichung für eine normierte Fortschrittsvariable gelöst, die gleich Null auf der unverbrannte Seite ist und gleich Eins auf der verbrannte Seite ist. Eine für Teilvormischflammen geeignete Erweiterung wurde von Maltsev vorgeschlagen [73]. Da der Schwerpunkt dieser Arbeit die Methode der G-Gleichung ist wird sie im weiteren beschrieben. Die G-Gleichung beschreibt die Ausbreitung der Flammenfläche im turbulenten Strömungsfeld. Die G-Gleichung ist nur auf der Flammenfront selbst gültig, da abseits keine Brenngeschwindigkeit definiert ist. Diese

Besonderheit bestimmt das von Diffusionsflammen unterschiedliche numerische Verfahren, das bei der Simulation zum Einsatz kommen muss.

Die erste Formulierung des G-Gleichungsmodells stammen von Markstein [75] und Williams [133]. Die Entwicklungen im Bereich der RANS-gemittelten G-Gleichung stammen von der Gruppe um Peters [89]. Die Gruppe um Oberlack [83, 84] beschäftigt sich mit den Symmetrieeigenschaften der G-Gleichung. Die Gruppe um Pitsch [95] beschäftigt sich mit der Kopplung von einer gefilterten G-Gleichung und LES. Die Gruppe um de Goey verallgemeinert die G-Gleichung, so dass nicht nur eine sondern alle Isoflächen innerhalb der Flammenfront verfolgt werden. Die Herleitung der G-Gleichung wird zuerst separat für das Regime der gefalteten Flammen und den Bereich der dünnen Reaktionszonen dargestellt. Danach wird die verallgemeinerte Form der G-Gleichung vorgestellt.

#### 3.6.3.1 Bereich der gefalteten Flammen

In dem Bereich der gefalteten Flammen sind die Kolmogorov-Eddies wesentlich größer als die Flammendicke ( $\eta \gg l_F$ ). Die Flammenfront kann als dünn angenommen werden und entspricht einer willkürlich zu wählenden Isolinie (bei zweidimensionaler Betrachtung) bzw. Isofläche (im dreidimensionalen Raum). Dieser die Reaktionsfront kennzeichnende Level, der orts- und zeitabhängig ist, ist durch

$$G(x_j, t) = G_0 \quad (3.47)$$

definiert.

Die Abbildung 3.8 stellt die Trennung in zwei Bereiche durch die  $G_0$  Isolinie dar, die entweder nichtreagierendes Gemisch (gekennzeichnet durch  $G < G_0$ ) oder bereits reagierendes Gemisch ( $G > G_0$ ) enthalten und repräsentiert gleichzeitig die kinematische Bilanz auf der Flammenfläche, woraus die Verschiebung der Flammenfront unter Berücksichtigung der Strömungsgeschwindigkeit  $\vec{u}$  und der laminaren Brenngeschwindigkeit  $s_L$  normal zur Flammenfront sich zu

$$\frac{dx_j^F}{dt} = u_j + s_L n_j \quad (3.48)$$

ergibt.

Differenziert man (3.47) nach Zeit  $t$ , so bekommt man

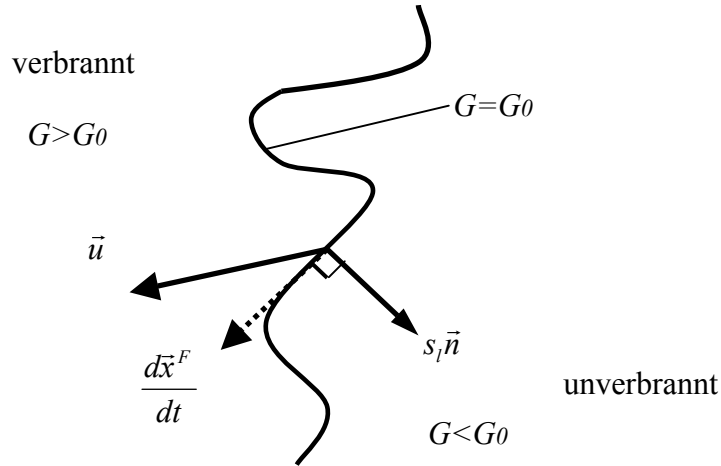
$$\frac{\partial G}{\partial t} + \frac{\partial G}{\partial x_j} \frac{dx_j}{dt} \bigg|_{G=G_0} = 0. \quad (3.49)$$

Unter Einbeziehung von (3.48) und Verwendung der Definition des Normalenvektors

$$n_j = - \frac{\partial G / \partial x_j}{|\nabla G|} \bigg|_{G=G_0} \quad \text{mit} \quad |\nabla G| = \sqrt{\frac{\partial G}{\partial x_j} \frac{\partial G}{\partial x_j}} \quad (3.50)$$

lässt sich die auf Williams [115] zurückgehende G-Gleichung ableiten zu

$$\frac{\partial G}{\partial t} + u_j \frac{\partial G}{\partial x_j} = s_L |\nabla G|. \quad (3.52)$$



**Abbildung 3.8 :** Vektorbilanz auf der Flammenfront

Neben der Zeitableitung und dem konvektiven Term beinhaltet die Gleichung (3.52) einen Quellterm, der die Flammenausbreitung beschreibt.

Der Einfluss von Flammenstreckung und Krümmung auf die ungestreckte Brenngeschwindigkeit  $s_L^0$  wurden von Matalon und Matkowsky [77] bzw. von Pelce und Clavin [88] berücksichtigt. Für endliche sehr dünne Flamendicken haben sie folgende Modifikation hergeleitet

$$s_L = s_L^0 \left[ 1 - L\kappa - \frac{L}{s_L^0} S \right]. \quad (3.53)$$

In (3.53) bezeichnen  $L$  die sogenannte Marksteinlänge,  $\kappa$  die Krümmung und  $S$  die aus dem Gradienten der Geschwindigkeit resultierende Streckung, die mit Hilfe von (3.54) durch

$$\kappa = \frac{\partial n_j}{\partial x_j} \quad (3.54)$$

und

$$S = -n_j \frac{\partial u_j}{\partial x_j} n_j \quad (3.55)$$

definiert sind. Wird (3.53) in die Ausgangsgleichung (3.52) eingesetzt, ergibt sich die kinematische G-Gleichung

$$\frac{\partial G}{\partial t} + u_j \frac{\partial G}{\partial x_j} = s_L^0 |\nabla G| - D_L \kappa |\nabla G| - LS |\nabla G| \quad (3.56)$$

mit Marksteindiffusivität

$$D_L = s_L^0 L. \quad (3.57)$$

Die Gleichung (3.56) ist nur auf der Flammenfront  $G=G_0$  definiert, außerhalb ist die ungestreckte Brenngeschwindigkeit  $s_L^0$  nicht definiert. In Gleichung (3.56) gehen die am Ort  $G=G_0$  vorliegende Strömungsgeschwindigkeit  $u_j$  und die Brenngeschwindigkeit  $s_L n_j$  ein.

#### 3.6.3.2 Bereich der dünnen Reaktionszonen

In diesem Bereich wird die Struktur der Flammenfront durch Eintreten der Kolmogorov-Wirbel in die Vorwärmezone nicht mehr als laminar angesehen, da der Wärme- bzw. Stoffhaushalt durch turbulente Mischungsprozesse beeinflusst wird. Die Flammendicke  $l_f$  kann gegenüber diesen Wirbeln nicht mehr als klein angesehen werden. Um eine in diesem Gebiet gültige Gleichung formulieren zu können, wird der Ort der Reaktionszone mit  $T(x_j, t) = T_0$  bezeichnet. Die Ableitung nach der Zeit liefert

$$\left. \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial T}{\partial x_j} \frac{dx_j}{dt} \right|_{T=T_0} = 0 \quad (3.58)$$

Echekki und Chen bestimmen eine auf  $T_0$  gültige Versatzgeschwindigkeit  $s_d$ , die in eine Vektorbilanz der Bewegung der Isofläche  $T_0$  analog zu (3.33) eingeht

$$s_d = \left[ \frac{\dot{\omega}}{\rho |\nabla T|} + \frac{\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho D \frac{\partial T}{\partial x_j} \right)}{\rho |\nabla T|} \right]_{T_0}. \quad (3.59)$$



(3.42) stellt eine Bilanz zwischen chemischen Quellterm  $\dot{\omega}$  und dem Diffusionsterm  $\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho D \frac{\partial T}{\partial x_j} \right)$  dar. Wird  $s_d$  in je einen Anteil für die Diffusion in Normalenrichtung  $s_n$

für die Krümmung  $s_\kappa$  und für die Reaktionsrate  $s_\omega$  aufgespalten, so lässt sich (3.59) folgendermaßen umschreiben

$$s_d = \left[ \underbrace{\frac{\dot{\omega}}{\rho |\nabla T|}}_{s_\omega} + \underbrace{\frac{n_j \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D n_j \frac{\partial T}{\partial x_j} \right)}{\rho |\nabla T|}}_{s_n} + \underbrace{D \left( \frac{\partial n_j}{\partial x_j} \right)}_{s_\kappa} \right]_{T_0}. \quad (3.60)$$

Da sowohl die Isofläche  $G=G_0$  als auch  $T=T_0$  die Lage der Reaktionszone beschreiben, werden beide Isofläche identisch betrachtet. Wird  $s_{L,s}$  als Summe von  $s_n$  und  $s_\omega$  formuliert, kann die G-Gleichung im Bereich der dünnen Reaktionszonen formuliert werden

$$\frac{\partial G}{\partial t} + u_j \frac{\partial G}{\partial x_j} = s_{L,s} |\nabla G| - D \kappa |\nabla G|. \quad (3.61)$$

#### 3.6.3.3 Verallgemeinerte G-Gleichung

Zur Anwendung der G-Gleichung auf den gesamten Bereich der technisch interessanten turbulenten Verbrennung leitet Peters [89] eine verallgemeinerte G-Gleichung her. Hierfür entdimensioniert er die Gleichungen mittels Kolmogorovskalen (2.2), gekennzeichnet durch den Index \*, wobei man folgende Terme der rechten Seite erhält:

**Tabelle 3.2:** Normierung der Quellterme.

	Gefaltete Flamme	Dünne Reaktionszone
Flammenausbreitung	$\frac{s_L^0}{u_\eta}  \nabla^* G $	$\frac{s_{L,s}}{u_\eta}  \nabla^* G $
Krümmung	$\frac{D_L}{\nu} \kappa^*  \nabla^* G $	$\frac{D}{\nu} \kappa^*  \nabla^* G $

Wird die Abschätzung der Größenordnung der einzelnen Terme im jeweils gültigen Bereich unter Berücksichtigung der Definition (3.46) für die Karlowitz-Zahl durchgeführt, können folgende Aussagen abgeleitet werden: Für die gefalteten

Flammen gilt  $Ka = (u_\eta / s_L^0)^2 < 1$ , so dass der normierte Ausbreitungsterm  $s_L^0 / u_\eta > 1$  ist. Unter der Annahme, dass die normierte Marksteinlänge  $L/\eta$  für  $\eta > L = O(l_F)$  klein ist, können der Diffusionsterm und der Streckungsterm, beide mit  $L/\eta$  skaliert, vernachlässigt werden. Im Bereich der dünnen Reaktionszone für  $Ka = (u_\eta / s_L^0)^2 > 1$  ist der Ausbreitungsterm  $s_L^0 / u_\eta < 1$  im Vergleich zum Krümmungsterm, für den  $D/\nu \approx 1$  ist, von untergeordneter Bedeutung. Da die in die Vorwärmezone eingehenden Wirbel eine Verstärkung der Mischungsprozesse verursachen, die mittels der Krümmung modelliert sind, dominiert der Krümmungsterm im Bereich der hohen Reynolds-Zahlen.

Werden in der G-Gleichung nur Terme führender Ordnung berücksichtigt, so ergibt sich nach Multiplikation mit der Dichte  $\rho$  die verallgemeinerte G-Gleichung

$$\rho \frac{\partial G}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial G}{\partial x_j} = \rho s_L^0 |\nabla G| - \rho D \kappa |\nabla G|. \quad (3.62)$$

Die Gleichung (3.62) ist, ebenso wie ihre zu Grunde liegende Formulierung, nur am Ort  $G(x_j, t) = G_0$  definiert und besitzt außerhalb keine physikalische Bedeutung. Die Gleichung (3.62), abgesehen vom Diffusionsterm, entspricht der typischen Struktur einer Skalartransportgleichung und lässt sich problemlos in der CFD-Code zur Beschreibung einer turbulenten reagierenden Strömung implementieren.

#### 3.6.3.4 Mittelung der G-Gleichung

Der momentane Wert  $G$  stellt einen Skalar dar, der auf den Ort  $G=G_0$  konditioniert ist. Die Durchführung einer Ensemble-Mittelung über das gesamte  $G$ -Feld ist, wie Oberlack et. al. [84] ausführen, unzulässig, da dadurch auch die Zustände  $G \neq G_0$  einfließen würden. Um das Problem zu vermeiden wird von der mittleren räumlichen Position der Flammenfron  $x_F$  ausgegangen [84, 89]. Der  $G_0$ -Level kann nun mit der Position  $x_F$  assoziiert werden und räumliche Abweichungen von  $x_F$  mit Abweichungen des  $G$ -Feldes von  $G_0$ , was  $(\tilde{G}(x) - G_0)/(x - x_F) = 1$  bzw.  $|\nabla \tilde{G}| = 1$  entspricht. So beschreibt die Standardabweichung  $(G''^2)^{1/2} = (x - x_F)^{1/2}$  eine mittlere räumliche Abweichung von der Position  $\tilde{G} = G_0$ . Somit werden Mittelwert und Varianz des  $G$ -Feldes als mittlere Position und Varianz der mittleren Position der Flammenfront interpretiert. Die Varianz wird weiter zur Beschreibung der turbulenten

Flammendicke  $l_{F,t}$  herangezogen. Die Erfüllung der Abstandsfunktion  $|\nabla \tilde{G}| = 1$  durch numerische Maßnahmen werden in Kapitel 5.4.2 beschrieben.

Die weiterhin von Peters durchgeführte Favre-Mittelung führt zur Transportgleichung für  $\tilde{G}$ :

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{G}}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_j} = - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j'' \tilde{G}'') + \bar{\rho} s_L^0 |\nabla \tilde{G}| - \bar{\rho} D \kappa |\nabla \tilde{G}|. \quad (3.63)$$

Drei Terme auf der rechten Seite (3.63) müssen modelliert werden. Der erste Term beschreibt den turbulenten Transport, der zweite die Flammenausbreitung und der dritte steht für den mittleren Krümmungsterm. Die Modellierung dieser Terme folgt den Ausführungen von Peters [89].

Da die laminare Diffusivität, die in den Krümmungsterm eingeht, im Bereich großer Reynolds-Zahlen sehr klein im Vergleich zur turbulenten Diffusivität ist, kann der Krümmungsterm vernachlässigt werden. Der turbulente Transport wird durch die Aufspaltung in einen Krümmungsterm und einen Diffusionsanteil normal zu  $G_0$ , wie sie bei der Modellierung der diffusiven  $G$ -Gleichung durchgeführt wurde, modelliert. Der zu  $G_0$  normale Diffusionsanteil gehört zur vernachlässigbaren laminaren Brenngeschwindigkeit  $s_{L,s}$  und wird nicht bei der Formulierung berücksichtigt. Mit der turbulenten Diffusivität ergibt sich für den modellierten turbulenten Transportterm

$$- \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j'' \tilde{G}'') = - \bar{\rho} D_t \tilde{\kappa} |\nabla \tilde{G}|. \quad (3.64)$$

Die Modellierung des Ausbreitungsterm wird auf der Grundlage der Formulierung einer turbulenten Brenngeschwindigkeit vorgenommen (siehe 3.4.5):

$$\bar{\rho} s_L^0 |\nabla \tilde{G}| = \bar{\rho} s_t^0 |\nabla \tilde{G}|. \quad (3.65)$$

$|\nabla \tilde{G}|$  kann, unter der Voraussetzung  $|\nabla \tilde{G}| = 1$ , als Maß für die Faltung der Flammenfront, im weiteren mit  $\bar{\sigma}$  bezeichnet, interpretiert werden:

$$\bar{\sigma} = \frac{s_t^0}{s_L^0} = \frac{s_L^0 + \Delta s}{s_L^0} = 1 + \bar{\sigma}_t. \quad (3.66)$$

$\bar{\sigma}_t$  stellt den Einfluss der Turbulenz auf Anstieg der laminaren Brenngeschwindigkeit dar. Dieser Zusammenhang wurde von Kerstein et al. [50] im Rahmen einer DNS der  $G$ -Gleichung, basierend auf dem Ansatz konstanter Dichte ohne Rückwirkung auf das Strömungsfeld, bestätigt.

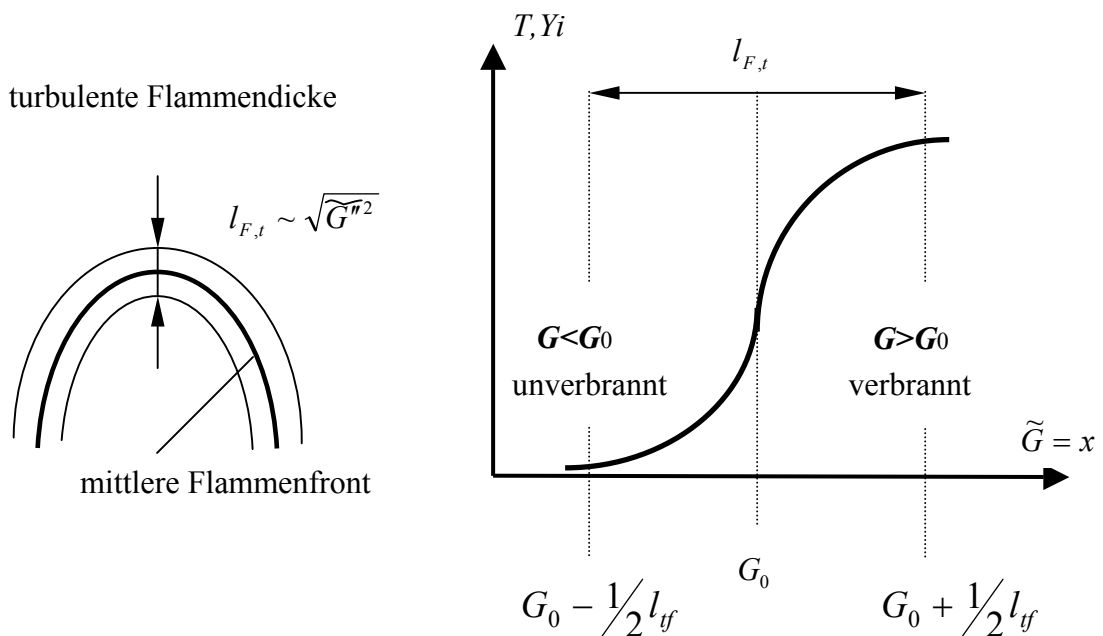
Werden (3.64) und (3.65) in (3.63) eingesetzt und die turbulente Diffusivität basierend auf dem Wirbelviskosität-Ansatz als  $D_t = \nu_t / \sigma_G$  definiert, bekommt man eine für das turbulente Strömungsfeld modellierte  $G$ -Gleichung:

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{G}}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_j} = \rho s_t^0 |\nabla \tilde{G}| - \bar{\rho} D_t \tilde{\kappa} |\nabla \tilde{G}|. \quad (3.67)$$

Die Transportgleichung für die Varianz des  $G$ -Feldes lautet in ihrer nichtmodellierten Form

$$\begin{aligned} \bar{\rho} \frac{\partial \tilde{G}''^2}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{G}''^2}{\partial x_j} = & - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j'' \tilde{G}''^2) \\ & - 2 \bar{\rho} \tilde{u}_j'' \tilde{G}'' \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_j} - \bar{\rho} \tilde{\omega}_G - \bar{\rho} \tilde{\chi} - (\rho D) \bar{K}_\sigma. \end{aligned} \quad (3.68)$$

Die Terme der rechten Seite bezeichnen den turbulenten Transport- und Produktionsterm, die kinematische Restauration, die eine Dämpfung von Fluktuationen auf der Flammenfront bewirkt, den skalaren Dissipationsterm und die Krümmung der Varianz. Da im Rahmen dieser Arbeit diese Gleichung nicht berücksichtigt wurde, findet man die ausführliche Diskussion zur Modellierung der einzelnen Beiträge bei Bray und Peters [11].



**Abbildung 3.8:** Position der turbulenten Flammenfront durch Mittelwert und Varianz des  $G$ -Feldes.

**Abbildung 3.9:** Breite der turbulenten Flammenfront durch Mittelwert und Varianz des  $G$ -Feldes.

Die Abbildungen 3.8 und 3.9 stellen die Position und Breite der turbulenten Flammenfront dar. Im Gegensatz zu laminaren Flammen, wo der Übergang vom unverbrannten zum verbrannten Zustand innerhalb der sehr dünnen laminaren Flammendicke stattfindet, entspricht der Übergangsbereich bei turbulenten Flammen einer turbulenten Flammendicke, die mit der Varianz wie folgt im Verhältnis steht.

$$l_{F,t} = \frac{\sqrt{\tilde{G}^2}}{|\nabla \tilde{G}|} \bigg|_{\tilde{G}=G_0} \quad (3.69)$$

Die dargestellte Mittelung der G-Gleichung (3.67) und (3.68) scheint im Hinblick der generalized scaling symmetry problematisch zu sein [84], da durch die Reynolds-Mittelung auf der Basis des momentanen G-Feldes die G-Werte in die Mittelung einfließen, die abseits der Flammenfront liegen und keine physikalische Bedeutung haben. Bei der direkten Berechnung der mittleren Position der Flammenfront durch Gleichung (3.67) tritt dieses Problem nicht auf.

#### 3.6.3.5 Turbulente Brenngeschwindigkeit

Es wurde experimentell beobachtet, dass die Brenngeschwindigkeit mit zunehmender Turbulenzintensität ansteigt, obwohl sie eine nur vom Mischungszustand abhängige Größe ist. Darin besteht eine der Hauptherausforderungen bei der Modellierung der turbulenten Vormischflammen, welcher in der Abbildung des Anstiegs der Brenngeschwindigkeit in der turbulenten Strömung liegt.

Die linke Seite der Abbildung 3.10 stellt eine laminare Flamme dar. Bei einer stationären Flammenfront ist die Geschwindigkeit des unverbrannten Gases  $u_u$  gleich der laminaren Flammengeschwindigkeit  $s_L$ . Für die Erhaltung der Masse in diesem System gilt

$$\rho_u s_L = \rho_u u_u. \quad (3.70)$$

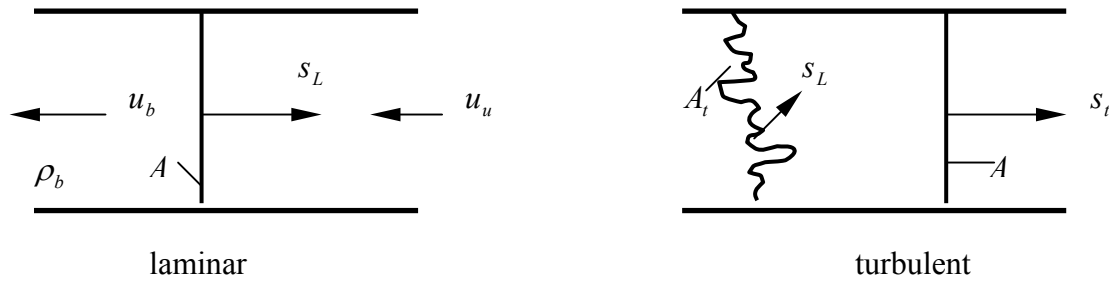
Die Dichteänderung führt zur Beschleunigung des Gases infolge der Volumenexpansion. Für die Massenbilanz in dem Fall gilt

$$\rho_u u_u = \rho_b u_b = \rho u. \quad (3.71)$$

Nun kann die Verbindung zwischen Strömungsgeschwindigkeit und Flammengeschwindigkeit hergestellt werden. Aus (3.70) und (3.71) bekommt man

$$(\rho s_L) = \rho u. \quad (3.72)$$

Die Klammern in (3.72) bedeuten einen konstanten Massenstrom.



**Abbildung 3.10:** Massenbilanz über der Flammenfront.

In einem turbulenten System ist die Flammenfront infolge Geschwindigkeitsfluktuationen gefaltet, wodurch ein insgesamt vermehrter Umsatz von Frischgas möglich ist. Bezogen auf die nominale Querschnittsfläche resultiert dies in einer Erhöhung der Flammengeschwindigkeit  $s_t$ . Die rechte Seite der Abbildung 3.10 veranschaulicht diesen Zusammenhang.

Nun kann man das Verhältnis zwischen der turbulenten und laminaren Flammengeschwindigkeit definieren:

$$\frac{s_t}{s_L} = \frac{A_t}{A}. \quad (3.73)$$

Damköhler formuliert einen Zusammenhang zwischen der turbulenten Flammengeschwindigkeit  $s_t$  und der Geschwindigkeitsfluktuationen  $u'$ . Für großskalige Wirbelstrukturen (gefaltete Flammen) ist der Zusammenhang lediglich kinematischer Natur:

$$s_t \sim u'. \quad (3.74)$$

Für kleinskalige Turbulenz (dünne Reaktionszone), wo sich ein intensivierter turbulenter Transport innerhalb der Flammenfront beobachten lässt, bekommt die Flammengeschwindigkeit zusätzlich zu dem kinematischen Zusammenhang nach (3.74) eine Abhängigkeit von dem turbulenten Längenmaß:

$$\frac{s_t}{s_L} \sim \left( \frac{u' l_t}{s_L l_F} \right)^{1/2}. \quad (3.75)$$

Zur Approximation der in die Gleichung (3.67) eingehenden turbulenten Flammengeschwindigkeit wird in dieser Arbeit ein Modell nach Peters [80] herangezogen. Dieses Modell berücksichtigt die von Damköhler postulierten Grenzfälle (3.74) und (3.75). Peters leitet ausgehend von der momentanen verallgemeinerten G-Gleichung (3.63) über die Transportgleichung für Variable  $\sigma$ , die in der gemittelten Form dem Flammenverhältnis (3.66) entspricht einen Ansatz zur Beschreibung des Anstiegs der Brenngeschwindigkeit her :

$$\frac{\Delta s}{u'} = -\frac{a_4 b_3^2}{2b_1} Da + \left[ \left( \frac{a_4 b_3^2}{2b_1} Da \right)^2 + a_4 b_3^2 Da \right]^{1/2}. \quad (3.76)$$

In diesen Ausdruck geht die Damköhler –Zahl ein, die als Verhältnis der turbulenten zur chemischen Zeitskala definiert ist. Die chemische Skala lässt sich aus der laminare Flammendicke und der Flammengeschwindigkeit ableiten (siehe 3.42). Die in die Damköhler-Zahl eingehende Fluktuation lässt sich aus der Annahme isotroper Turbulenz folgendermaßen bestimmen

$$u' = \left( \frac{2}{3} \tilde{k} \right)^{1/2}. \quad (3.77)$$

Bei der Berechnung des turbulenten Längenmaßes wird Ausdruck von Bray [10] benutzt

$$l_t = 0.37 \frac{u'^3}{\tilde{\varepsilon}}. \quad (3.78)$$

Die turbulente Brenngeschwindigkeit wird über

$$s_t^0 = s_L^0 + u' \left( \frac{\Delta s}{u'} \right) \quad (3.79)$$

bestimmt. Da die Formulierung (3.59) das Verhältnis aus turbulentem Längenmaß und laminare Flammendicke enthält, besitzt dieser Ansatz seine Gültigkeit sowohl im Bereich der gefalteten Flammen als auch im Bereich der dünnen Reaktionszonen. Der Ursprung der in (3.59) eingehenden Konstanten wird in [89] diskutiert. Die Konstanten werden in der Tabelle 3.3 aufgelistet.

Der Zusammenhang zwischen der turbulenten Flammendicke und dem turbulenten Längenmaß wurde nach Peters folgendermaßen definiert

$$l_{F,t} = l_t b_2. \quad (3.80)$$

Der Proportionalitätsfaktor ist ebenfalls in der Tabelle 3.3 enthalten.

**Tabelle 3.3:** Konstanten des Modells für die turbulente Brenngeschwindigkeit nach Peters [76]

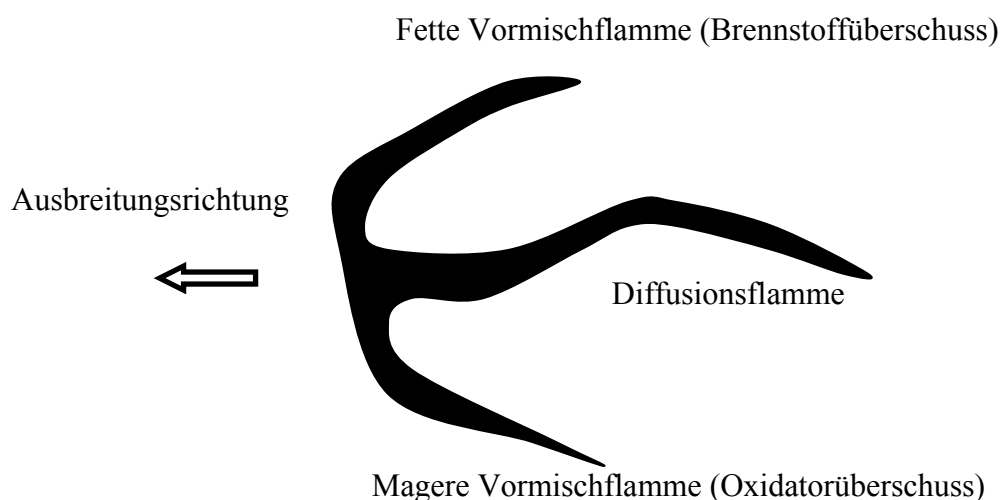
$a_4$	$b_1$	$b_2$	$b_3$
0.78	2.0	1.78	1.0

Für die Berechnungen stationärer Konfigurationen, die in dieser Arbeit stattgefunden haben, wird der Zusammenhang (3.80) als ausreichend angesehen. Für die

Betrachtung instationärer Konfigurationen muss die Gleichung (3.68) herangezogen werden.

#### 3.7 Teilvorgemischte Verbrennung

Die Unterscheidung zwischen Diffusions- und Vormischflammen ist nicht für alle Flammentypen eindeutig. In technischen Anwendungen, wie z.B. in stationären Gasturbinen, trifft man oft die Kombination dieser beiden Flammentypen, die sich als partiell- oder teilvorgemischt bezeichnen lässt. Die teilvorgemischte Verbrennung, der Definition nach Peters entsprechend, findet statt, wenn Oxidator und Brennstoff getrennt zugeführt sind, werden aber vor Erreichen des Reaktionsortes durch Turbulenz auf molekularem Niveau partiell vorgemischt. In partiell vorgemischten Systemen befindet sich das Äquivalenzverhältnis  $\Phi$  der Frischgasmischung in der Nähe der Flammenfront innerhalb der Zündgrenze, kann aber nicht wie in Vormischflammen a priori definiert werden, da zusätzliche Mischung vor Erreichen des Reaktionsortes stattfindet. Die Änderungen des Äquivalenzverhältnisses beeinflusst direkt die Ausbreitung der Flamme. Variiert das Äquivalenzverhältnis im mageren Bereich ( $\Phi < 1$  oder  $\xi < \xi_{st}$ ), wird der Brennstoff in der Flammenfront komplett konsumiert. Wird die Mischung durch fette Werte des Äquivalenzverhältnisses ( $\Phi > 1$  oder  $\xi > \xi_{st}$ ) charakterisiert, bildet sich neben der Vormischflamme während der Reaktion des überflüssigen Brennstoff mit dem Oxidator eine zusätzliche Diffusionsflamme aus. Diese Flammenstruktur wurde erstmals durch Phillips [94] beschrieben und *triple flame* genannt. Ein Beispiel der *triple flame* ist in der Abbildung 3.11 schematisch dargestellt. Die Struktur solcher Flammen hängt von der Austrittsgeschwindigkeit an der Düse ab. Bei relativ niedrigen Geschwindigkeiten stabilisiert sich die Diffusionsflamme am Brenner. Erhöht man die Austrittsgeschwindigkeit, so lässt sich die Flamme stromabwärts stabilisieren.



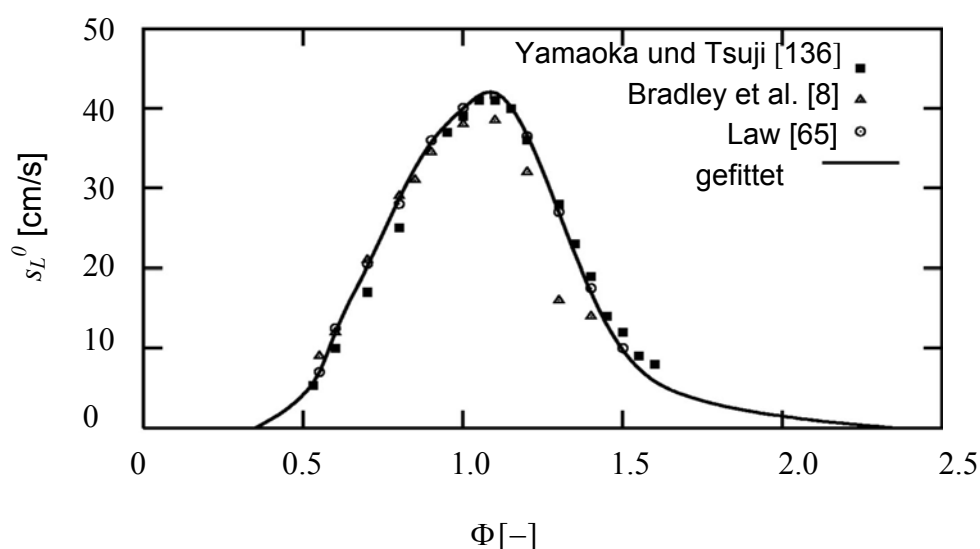
**Abbildung 3.11:** Beispiel der *triple flame*.



Zur Erklärung des Stabilisierungsmechanismus geht man davon aus, dass an der Flammenfront Brennstoff und Oxidator innerhalb der Zündgrenzen vorgemischt sind und somit eine für die Vormischverbrennung typische Brenngeschwindigkeit vorliegt. Bei lokalem Gleichgewicht der Strömungs- und Brenngeschwindigkeit entsteht eine stabile Flamme. Befindet sich die Mischung in einem fetten (mageren) Zustand, entsteht demnach eine fette (magere) Vormischflamme. Der überflüssige Brennstoff reagiert mit dem Oxidator und bildet eine Diffusionsflamme entlang der Fläche stöchiometrischen Mischungsgrades. Zusammengefasst lassen sich dementsprechend drei Flammenzonen unterscheiden: magere Vormischflamme, fette Vormischflamme und Diffusionsflamme. Der Stabilisierungsort ist von der Austrittsgeschwindigkeit abhängig und durch die Abhebehöhe charakterisiert. Mit steigender Austrittsgeschwindigkeit wandert die Flamme weiter stromabwärts bis sie endgültig verlöscht.

Teilvorgemischte Flammen stellen ein sehr komplexes Phänomen der Interaktion unterschiedlicher Prozesse dar. In dieser Arbeit wurde ein Modellierungsmechanismus ausgewählt, der eine Kombination von Modellen zur Beschreibung von Diffusionsflammen und G-Gleichungsmodell für Vormischflammen darstellt. Die Kopplung erfolgt über den Mischungsgrad. Bei der Modellierung der in die G-Gleichung eingehenden Brenngeschwindigkeit (3.56) wird die Abhängigkeit der laminaren Brenngeschwindigkeit vom Mischungsgrad auf Grund inhomogenen Mischungszustands folgendermaßen berücksichtigt: Führt man diese Mischungsgradabhängigkeit ein, so lautet die Damköhler Zahl in (3.59)

$$Da(\xi) = \frac{s_L^2(\xi) l_t}{u'D} \quad (3.81)$$



**Abbildung 3.12:** Laminare ungestreckte Brenngeschwindigkeit  $s_L^0$  des CH<sub>4</sub>-Luft Reaktionssystems bei  $T_u=298$  K,  $p=0.1$  MPa als Funktion der Brennstoffzahl.

Für die Simulation teilvorgemischter CH<sub>4</sub>-Luft Flammen wurde in dieser Arbeit für die Berechnung der laminaren Brenngeschwindigkeit die Daten von Law [65] benutzt (Abbildung 3.12).

Die detaillierte Beschreibung des Kopplungsmechanismus zwischen den chemischen Modellen und der G-Gleichung wird in dem nächsten Kapitel durchgeführt.

#### 3.8 Kopplung der ILDM-Chemie mit der G-Gleichung

Die Kopplung zwischen Chemie und der G-Gleichung basiert auf der Konditionierung der Reaktionsfortschrittsvariablen auf der Flammenfront, deren Position aus der Lösung der G-Gleichung resultiert und das Rechenggebiet in verbrannten und unverbrannten Zustand unterteilt. Wird zur Beschreibung des verbrannten bzw. unverbrannten Gemischzustands die Wahrscheinlichkeit  $p^b$  eingeführt, lässt sich die im Rahmen der ILDM Chemie verwendete Reaktionsfortschrittvariable  $Y_\alpha$  über

$$Y_\alpha = Y_\alpha^b p^b + Y_\alpha^u (1 - p^b) \quad \begin{cases} p^b = 0 & \text{unverbrannt} \\ p^b = 1 & \text{verbrannt} \end{cases} \quad (3.82)$$

definieren. Nach der Durchführung der dichtegewichteten Favre-Mittelung von (4.39) bekommt man

$$\frac{\overline{\rho Y_\alpha}}{\bar{\rho}} = \frac{\overline{\rho Y_\alpha p^b}}{\bar{\rho}} + \frac{\overline{\rho Y_\alpha (1 - p^b)}}{\bar{\rho}}. \quad (3.83)$$

Durch die Einführung der nur auf einen Zustand konditionierten Variablen

$$\tilde{Y}_\alpha^b = \frac{\overline{\rho Y_\alpha p^b}}{\bar{\rho} \tilde{p}^b} \quad \tilde{Y}_\alpha^u = \frac{\overline{\rho Y_\alpha (1 - p^b)}}{\bar{\rho} (1 - \tilde{p}^b)} \quad (3.84)$$

lässt sich der Zusammenhang zwischen der ursprünglichen, physikalischen und der konditionierten Reaktionsfortschrittvariablen entsprechend (3.85) angeben als

$$\tilde{Y}_\alpha = \tilde{Y}_\alpha^b \tilde{p}^b + \tilde{Y}_\alpha^u (1 - \tilde{p}^b). \quad (3.85)$$

Die Favre gemittelte Wahrscheinlichkeit  $\tilde{p}^b$  im verbrannten Zustand anzutreffen nimmt im Übergangsbereich der turbulenten Flamme Werte zwischen 0 und 1 an. Die Reaktionsfortschrittsvariablen, die in dieser Arbeit verwendet wurden, dies sind die Massenbrüche von CO<sub>2</sub> und H<sub>2</sub>O, existieren nur im verbrannten Zustand, d.h

$\tilde{Y}_\alpha^u = 0$  und es reicht aus, die Transportgleichung nur für den verbrannten Zustand zu lösen.

Die Transportgleichungen für die Favre-gemittelten konditionierten Mittelwerte und Varianzen der Reaktionsfortschrittsvariablen  $\tilde{Y}_\alpha^b$  und  $\tilde{Y}_\alpha^{b^2}$  sind

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{Y}_\alpha^b) + \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{Y}_\alpha^b) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \bar{\rho} \left( \frac{\nu_t}{\sigma_{\varphi 1}} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha^b}{\partial x_j} \right] + \bar{\omega}_\alpha^b + \bar{\rho}\tilde{F}_1^b \quad (3.86)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{Y}_\alpha^{b^2}) + \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{Y}_\alpha^{b^2}) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \bar{\rho} \left( \frac{\nu_t}{\sigma_{\varphi 1}} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha^{b^2}}{\partial x_j} \right] + 2\bar{\rho} \frac{\nu_t}{\sigma_{\varphi 1}} \left( \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha^b}{\partial x_j} \right) \\ &\quad - 2\bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \tilde{Y}_\alpha^{b^2} + \overline{2Y_\alpha^{b^2}\dot{\omega}_\alpha^b} + \bar{\rho}\tilde{F}_2^b. \end{aligned} \quad (3.87)$$

Die in (3.86) und (3.87) eingehenden konditionierten chemischen Quellterme werden als

$$\begin{aligned} \bar{\omega}_\alpha^b &= \bar{\rho} \frac{\widetilde{S_\alpha p^b}}{\tilde{p}^b} \approx \bar{\rho}\tilde{S}_\alpha \\ \text{und} \\ \overline{Y_\alpha^{b^2}\dot{\omega}_\alpha^b} &= \bar{\rho} \left( \frac{\widetilde{Y_\alpha^b S_\alpha p^b}}{\tilde{p}^b} - \tilde{Y}_\alpha^b \frac{\widetilde{S_\alpha p^b}}{\tilde{p}^b} \right) \approx \bar{\rho}(\tilde{Y}_\alpha^b \tilde{S}_\alpha - \tilde{Y}_\alpha^b \tilde{S}_\alpha) \end{aligned} \quad (3.88)$$

modelliert.

Die aus der Konditionierung resultierenden Quellterme  $\tilde{F}_1^b$  und  $\tilde{F}_2^b$  ergeben sich zu (siehe Janicka [40])

$$\begin{aligned} \tilde{F}_1^b &= -(1 - \tilde{p}^b)(\tilde{u}_j^b - \tilde{u}_j^u) \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha^b}{\partial x_j} \\ \text{und} \\ \tilde{F}_2^b &= -(1 - \tilde{p}^b)(\tilde{u}_j^b - \tilde{u}_j^u) \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha^{b^2}}{\partial x_j}. \end{aligned} \quad (3.89)$$

Die Auswertung der auf den verbrannten bzw. unverbrannten Zustand konditionierten Geschwindigkeiten  $\tilde{u}_j^b$  und  $\tilde{u}_j^u$  führt zu

$$\tilde{u}_j^b = \tilde{u}_j \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}^b}$$

und

$$\tilde{u}_j^u = \tilde{u}_j \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}^u}. \quad (3.90)$$

#### 3.8.1 Gemittelte Übergangswahrscheinlichkeit

Ausgehend von Messungen von Wirth [135] wird  $G$  innerhalb der turbulenten Flammendicke (3.69), (3.80) als Gaußverteilt angenommen, so dass sich die Übergangswahrscheinlichkeit aus dem  $G$ -Feld über

$$\tilde{p}^b = \int_{G=G_0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\tilde{G}''^2}} \cdot \exp\left[-\frac{(G-\tilde{G})^2}{2\tilde{G}''^2}\right] \cdot dG \quad (3.91)$$

ergibt. In dieser Arbeit wird der Übergangsbereich über eine geglättete Dirac-Funktion approximiert, die zusätzlich den Vorteil einfacher numerischer Handhabbarkeit aufweist. Werden die Abstandsbedingungen  $|\nabla \tilde{G}| = 1$  erfüllt, so folgt der Zusammenhang zwischen dem räumlichen Abstand und dem  $G$ -Feld ( $\Delta x = \tilde{G} - G_0$ ), und die PDF von  $G$  kann über

$$P_{\delta}(\Delta x) = \begin{cases} \frac{1}{l_{F,t}} \left[ 1 + \cos\left(2\pi \frac{\Delta x}{l_{F,t}}\right) \right] & \text{für } |\Delta x| < 1/2 l_{F,t} \\ 0 & \text{für } |\Delta x| > 1/2 l_{F,t} \end{cases} \quad (3.92)$$

approximiert werden. Die Integration von (3.92) ergibt die Wahrscheinlichkeit  $\tilde{p}^b$  innerhalb des Übergangsbereichs

$$\tilde{p}^b = \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{2(\tilde{G} - G_0)}{l_{F,t}} + \frac{1}{\pi} \sin\left(2\pi \frac{\tilde{G} - G_0}{l_{F,t}}\right) \right]. \quad (3.93)$$

# 4. Wärmeübertragung durch Strahlung

Ein wesentlicher Aspekt bei der Flammenmodellierung ist neben der Beschreibung des Strömungsfeldes und der Verbrennungsreaktionen die Wärmeübertragung, die aufgrund der in technischen Verbrennungssystemen vorherrschenden hohen Temperaturen durch den Mechanismus der Strahlungswärmeübertragung dominiert wird. In Gasturbinenbrennkammern wird das Flammrohr sehr hohen Strahlungswärmebelastungen ausgesetzt. Dies erklärt sich durch die sehr hohen Flammentemperaturen von über 2400K und den sehr hohen Brennkammerdrücken. In modernen Flugtriebwerken werden heute bereits Drücke von 40 bar erreicht. Um die Brennkammerwände vor diesen hohen Wärmebelastungen zu schützen, die mehr als  $1.5\text{MW/m}^2$  betragen können [54], müssen sie gekühlt werden. Zur Bestimmung des Kühlluftbedarfs und der Temperaturverteilung der Brennkammerwände sind deshalb in Gasturbinenbrennkammern genaue Kenntnisse des Strahlungswärmeübergangs an die Brennkammerwände notwendig. Darüberhinaus wird das Temperaturfeld der Flamme durch die Strahlungswärmeverluste des Brennraums beeinflusst.

Die wesentlichen direkten Einflussgrößen auf den Strahlungswärmeaustausch sind die Temperaturverteilung in der Flamme und auf den Brennkammerwänden, die Konzentrationsverteilungen der strahlungsaktiven Spezies und Strahlungseigenschaften dieser Spezies sowie der Wandmaterialien. Die strahlungsaktiven Spezies sind  $\text{Ru}\beta$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$  und  $\text{H}_2\text{O}$ . Für eine korrekte Bestimmung des Strahlungsaustauschs ist die Kenntnis des Rußanteils daher notwendig. Demnach sind in der Verbrennungstechnik die Rußbildung und damit der Rußgehalt industrieller Flammen hinsichtlich der erhöhten Strahlungswärmeübertragung und unter dem Gesichtspunkt des Umweltschutzes durch relevanten Austrag von Rußpartikeln aus Flammen bei unvollständiger Verbrennung von großer Bedeutung. In diesem Kapitel werden Modelle zur Berechnung des Strahlungswärmeübergangs und der Rußbildung dargestellt.

## 4.1 Strahlung

Die charakteristische Größe zur Beschreibung des spektralen mehrdimensionalen Wärmeübergangs ist die Strahlungsintensität  $I_\lambda$ , die als die Strahlungsleistung definiert werden kann, die von einer in die Abstrahlrichtung  $\Omega$  projizierten Fläche,

deren Ort durch Koordinaten  $x, y, z$  bestimmt ist, in einen durch das infinitesimal kleine Raumwinkelintervall  $d\Omega$  begrenzten Strahlenkegel sowie einem spektralen Wellenlängenbereich  $d\lambda$  abgestrahlt wird. Die Verteilung der Strahlungsintensität entlang der Kurvenkoordinaten  $s$  kann mit Hilfe folgender Transportgleichung beschrieben werden.

$$\frac{dI_\lambda}{ds} = - \underbrace{\kappa_\lambda I_\lambda}_A - \underbrace{\sigma_{s,\lambda} I_\lambda}_B + \underbrace{\kappa_\lambda B_\lambda(T)}_C + \underbrace{\frac{\sigma_{s,\lambda}}{4\pi} \int_0^{4\pi} P_\lambda(\vec{\Omega}'' \rightarrow \vec{\Omega}) I_\lambda(\vec{\Omega}'') d\Omega''}_D \quad (4.1)$$

Term A ergibt die Abschwächung der Strahlungsintensität durch ein absorbierendes Medium,  $\kappa_\lambda$  ist der Absorptionskoeffizient, der von dem durchstrahlten Medium und der Wellenlänge abhängig ist.

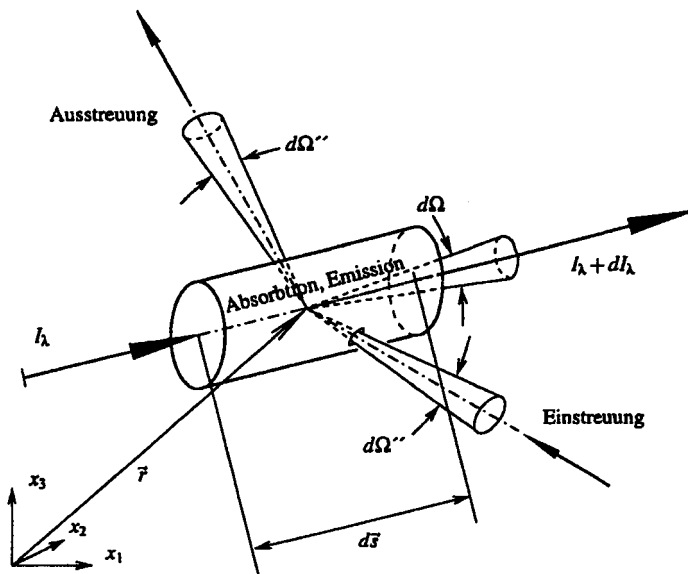
Term B repräsentiert die Streuung aus der betrachteten Richtung.  $\sigma_{s,\lambda}$  ist der Streukoeffizient, der ein Maß für die Beschreibung des Anteils der Strahlungsintensität aus der betrachteten Raumrichtung in andere Raumrichtungen darstellt. Der Streukoeffizient ist auch von Medium und Wellenlänge abhängig.

Term C beschreibt die Verstärkung der Strahlungsintensität durch von einem strahlungsaktiven Medium emittierter Strahlung. Bei der Formulierung des Term C wurde schon die Gültigkeit des Kirchhoffschen Gesetzes zugrunde gelegt und der Emissionskoeffizient mit dem Absorptionskoeffizient gleichgesetzt.  $B_\lambda(T)$  ist die Schwarzkörperintensität, die durch das Plancksche Strahlungsgesetz beschrieben wird:

$$B_\lambda(T) = \frac{2 h_p c^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda k_B T} - 1} \quad (4.2)$$

Term D ergibt die Verstärkung durch die Einstreuung von Strahlung aus anderen Raumrichtungen.  $P_\lambda$  stellt hier die Streufunktion dar. Sie beschreibt, welcher Anteil der Streustrahlung der Intensität  $I_\lambda$  aus der Raumrichtung  $\vec{\Omega}''$  in die betrachtete Richtung gestreut wird. Die Abbildung 4.1 veranschaulicht die Definition der Strahlungsintensität.

Um den Strahlungstransport beschreiben zu können, müssen Modelle eingesetzt werden, die in der Lage sind die Orts-, Raumwinkel- und spektrale Abhängigkeit der Gleichung (4.1) zu repräsentieren. Die Modelle, die zur mathematischen Beschreibung dieser Abhängigkeit dienen, sind in Abbildung 4.2 schematisch dargestellt.



**Abbildung 4.1:** Definition der spektralen Strahlungsintensität.

### 4.1.1 Beschreibung der angularen Abhängigkeit

Der Strahlungswärmeübergang unterscheidet sich von dem konvektiven und diffusiven durch zusätzliche Raumwinkelabhängigkeit. In einem dreidimensionalen System wird der Strahlungstransport somit zu einem fünfdimensionalen Problem, da zu den drei Raumkoordinaten noch der Azimuth und der Elevationswinkel als unabhängige geometrische Variablen zur Beschreibung der Strahlungsintensität notwendig sind. Die numerische Behandlung dieser Abhängigkeit ist eine der wesentlichen Schwierigkeiten bei der Berechnung des spektralen mehrdimensionalen Wärmeübergang. Eine Vielzahl von Methoden zur Beschreibung der angularen Abhängigkeit wurde entwickelt. Es handelt sich um Monte Carlo Methoden (Steward und Cannon [122], Farmer und Howell [35]), Zonen Methoden (Hottel und Sarofim [39]), Integralmethoden (Crosbie et al.[22]), Flussmethode (Siddall und Selcuk [117]), die Methode der Diskreten Ordinaten (Chandrasekhar [18], Carlson und Lathrop [16], Koch [52] ), und Spherical Harmonics Methode (Case und Zweifel [17], Ou und Liou [86]).

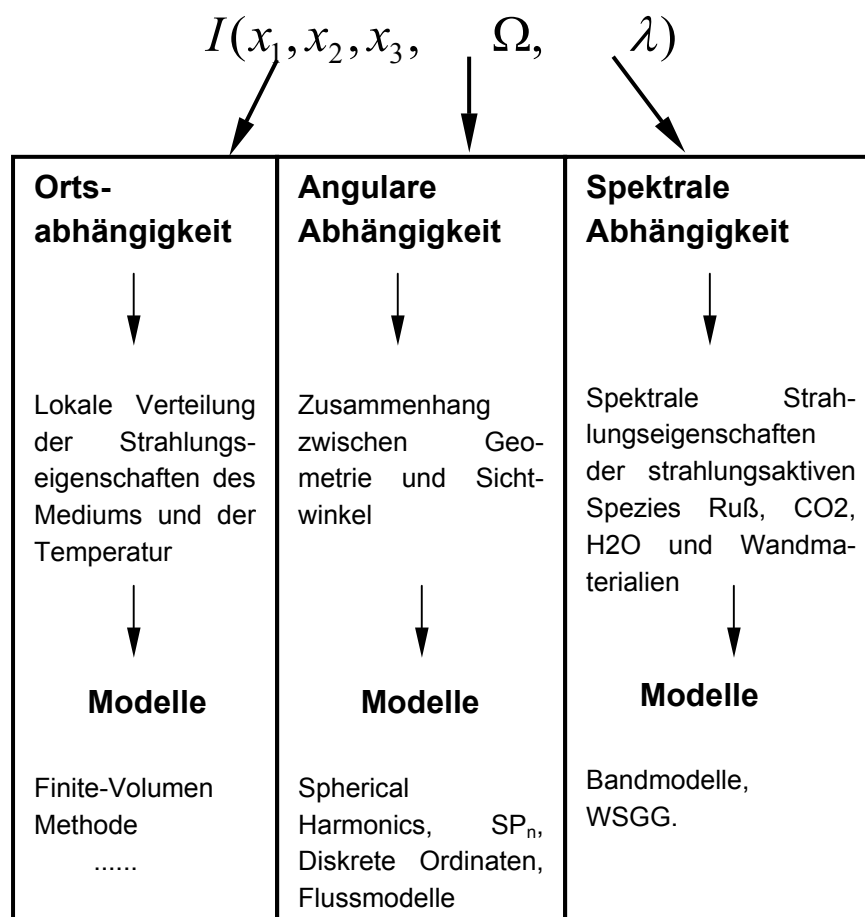
Ziel aller Methoden ist die Transformation der Strahlungstransportgleichung in ein System von Transportgleichungen, in denen die angular Abhängigkeit nicht mehr auftritt und die Strahlungstransportgleichungen auf demselben Gitter und mit gleichen numerischen Verfahren wie die Energiegleichung berechnet werden kann.

Die bekannten Verfahren lassen sich grundsätzlich in zwei Gruppen einteilen:

- Integrale Methoden
- Differentielle Methoden

Bei den integralen Methoden wird das Rechengebiet in Zonen konstanter Strahlungseigenschaften unterteilt und direkt der Strahlungsaustausch zwischen den einzelnen homogenen Zonen berechnet. Damit werden die Orts- und Raumwinkelabhängigkeit gleichzeitig behandelt. Die Integralen Methoden liefern sehr genaue Ergebnisse bei der Berechnung des mehrdimensionalen Strahlungstransports und werden gerne als Referenzmethoden eingesetzt. Der große Nachteil der Integralmethoden besteht in den sehr langen Rechenzeiten. Das macht diese Methode für technische Anwendungen ungeeignet.

Bei den differentiellen Methoden wird zuerst der Raumwinkel in geeigneter Weise diskretisiert. Die nach der Raumdiskretisierung entstehenden Transportgleichungen sind nur vom Ort abhängig und können mit einem geeigneten Ortsdiskretisierungsverfahren numerisch gelöst werden. Die verschiedenen differentiellen Methoden unterscheiden sich prinzipiell in der Repräsentation der angularen Strahlungsverteilung.



**Abbildung 4.2:** Abhängigkeiten der Strahlungsintensität.

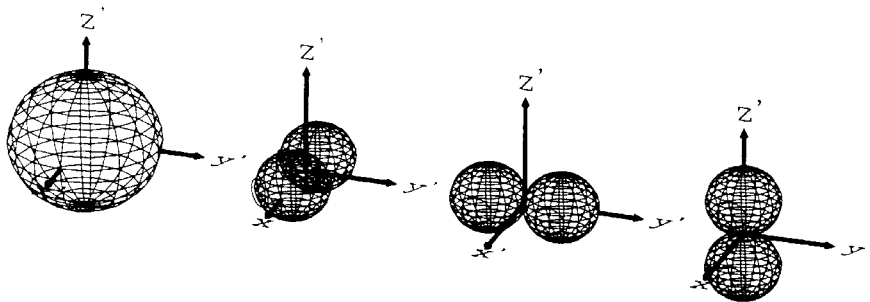


### 4.1.2 Die $SP_N$ Methode zur Berechnung des Strahlungstransports

In dieser Arbeit hat die sogenannte  $SP_N$  Methode (Simplified  $P_N$ ) Anwendung gefunden [9, 112, 127]. Die Grundlage des Modells ist die Kugelflächenfunktions-Methode ( $P_N$ ), bei der die angulare Abhängigkeit der Strahlungsintensität  $I_\lambda$  mit der Transportgleichung (4.1) in eine Reihe zueinander orthogonaler Ansatzfunktionen entwickelt wird

$$I_\lambda(\vec{x}, \vec{\Omega}) = \sum_{n=1}^N \sum_{m=-l}^{+l} \varphi_l^m(\vec{x}, \lambda, t) \cdot Y_l^m(\vec{\Omega}). \quad (4.3)$$

Dabei bezeichnet  $n$  die Ordnung der Kugelflächenfunktion mit  $m=-l \dots l$ . Die angulare Abhängigkeit wird von den übrigen Abhängigkeiten dadurch getrennt, dass sie durch Überlagerung verschiedener Kugelflächenfunktionen  $Y_l^m$ , die alleine vom Raumwinkel  $\vec{\Omega}$  abhängen, wiedergegeben wird. In den Entwicklungskoeffizienten  $\varphi_l^m$  wird dann ausschließlich die Abhängigkeit vom Ort, der Zeit und der Wellenlänge berücksichtigt. Die Kugelflächenfunktionen werden mathematisch über die Legendre Polynome zweiter Art definiert. Abbildung 4.3 stellt die realen Kugelflächenfunktionen dar.



**Abbildung 4.3:** Darstellung der Kugelflächenfunktionen 0. und 1.Ordnung.

Wird die Reihe nach  $n=N$  abgebrochen bekommt man ein  $P_N$ -System.

Der große Vorteil dieser mathematisch „elegantesten“ aller Methoden besteht darin, dass im Fall der  $P_1$ -Approximationen die mehrdimensionale Strahlungsausbreitung nur durch eine Transportgleichung beschrieben wird, die überdies keine richtungsabhängigen Größen mehr enthält. Dennoch ist für eine größere Genauigkeit eine Approximation höherer Ordnung notwendig. Dann ist die Zahl der Gleichungen proportional  $(N+1)^2$ . Um die Zahl der Gleichungen zu reduzieren, wird die „Simplified  $P_N$ “ ( $SP_N$ ) –Methode eingeführt, in der ein eindimensionales planares System formal auf mehrdimensionale Fälle übertragen wird. Für 1D planare Geometrie lautet die Strahlungsintensitätsgleichung

$$\mu \nabla I + (\kappa + \sigma_s) I = \frac{\sigma_s}{2} \int_{-1}^{+1} I(\mu) d\mu + \kappa B. \quad (4.5)$$

Die angulare Abhängigkeit der Strahlungsintensität ist nun auf  $\mu[-1, +1]$  begrenzt, wobei  $\mu = \cos \theta$ .  $\theta = n \cdot \vec{\Omega}$  und definiert den Winkel zwieschen der Normale zur betrachteten Oberfläche und der Strahlungsrichtung  $\vec{\Omega}$ . Die Legendre Polynome lauten:

$$\begin{aligned} P_0(\mu) &= 1 \\ P_1(\mu) &= \mu \\ P_{l+1}(\mu) &= \frac{2l+1}{l+1} \mu P_l(\mu) - \frac{l}{l+1} P_{l-1}(\mu). \end{aligned} \quad (4.6)$$

Mit  $\int_{-1}^{+1} P_l^2(\mu) d\mu = \frac{2}{2l+1}$  kann die Strahlungsintensität in (4.3) entsprechend ausgedrückt werden:

$$I(x, \mu) = \sum_{l=0}^N \frac{2l+1}{2} \varphi_l(x) P_l(\mu) \quad (4.7)$$

Die Rekursion für die Polynome kann benutzt werden um  $\mu I$  zu repräsentieren:

$$\mu I = \frac{1}{2} \varphi_1 P_0 + \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N l \varphi_{l-1} P_l + \frac{1}{2} (l+1) \varphi_{l+1} P_l + \frac{1}{2} (N+1) \varphi_N P_{N+1}. \quad (4.8)$$

Einsetzen von (4.7) in die Gleichung (4.5), multiplizieren mit  $\varphi_0, \dots, \varphi_N$  und integrieren über  $\mu$  ergibt ein  $P_N$  System. Für  $P_1$  bekommt man:

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{3(\kappa + \sigma_s)} \frac{\partial \varphi_0}{\partial x} \right) + \kappa \varphi_0 = 2\kappa B. \quad (4.9)$$

Zur Herleitung der  $SP_N$ -Gleichungen lautet die Strahlungstransportgleichung für  $\sigma_s = 0$ ,

$$\left(1 + \frac{\vec{\Omega}}{\kappa} \nabla\right) I(x, t, \vec{\Omega}, \nu) = B(\nu, T), \quad (4.10)$$

wobei die Richtungsableitung wird als  $\frac{dI_\lambda}{ds} = \vec{\Omega} \cdot \nabla I_\lambda$  dargestellt und  $\nu = c/\lambda$  ist die Frequenz.

Nach der Verwendung von Neumann'schen Reihen und integrieren über  $\Omega$  bekommt man die asymptotische Expansion der Variablen  $\varphi$  :

$$4\pi B = \left[ 1 - \frac{\varepsilon^2}{3\kappa^2} \nabla^2 - \frac{4\varepsilon^4}{45\kappa^4} \nabla^4 - \frac{44\varepsilon^6}{945\kappa^6} \nabla^6 \right] \varphi + O(\varepsilon^8), \quad (4.11)$$

wobei  $\varphi = \int \frac{I(\Omega) d\Omega}{s^2}$  den Strahlungsenergiefluß darstellt und  $\varepsilon = \frac{1}{\kappa_{ref} x_{ref}}$  ist die

Diffusionsskala,  $\varepsilon = [0,1]$ .

Wird die Reihe nach dem zweiten Term auf der rechten Seite abgebrochen entsteht die  $SP_1$  Approximation. Die  $SP_2$  und  $SP_3$  bekommt man, wenn die Reihe entsprechend nach dem zweiten oder dritten Term abgebrochen wird. In dieser Arbeit wurden  $SP_N$  Modelle erster und zweiter Ordnung implementiert.

Für das  $SP_1$  –Gleichungssystem gilt:

Die Energiegleichung lautet

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{h})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}\tilde{h})}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\lambda \partial \tilde{h}}{\rho c_p \partial x_i} \right) + \underbrace{\int_{\nu_1}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\partial \varphi}{3\kappa_{\nu} \partial x_i} \right) d\nu}_{\text{Strahlungs quellterm}}, \quad (4.12)$$

mit  $\lambda$ : Wärmeleitfähigkeit,  $c_p$ : Wärmekapazität .

Die Strahlungsflusstransportgleichung wird für jeden Frequenzbereich gelöst und lautet:

$$\forall \nu > \nu_1 : \quad -\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{1}{3\kappa_{\nu}} \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right) + \kappa_{\nu} \varphi = \kappa_{\nu} (4\pi B). \quad (4.13)$$

Das Gleichungssystem für das  $SP_3$  Modell lautet:

Die Energiegleichung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{h})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}\tilde{h})}{\partial x_i} = & -\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\lambda \partial \tilde{h}}{\rho c_p \partial x_i} \right) \\ & + \underbrace{\int_{\nu_1}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\partial(a_1\varphi_1 + a_2\varphi_2)}{\kappa_{\nu} \partial x_i} \right) d\nu}_{\text{Strahlungs quellterm}}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Die Strahlungsflusstransportgleichung in jedem Frequenzbereich:

$$\forall \nu > \nu_1 : \quad -\mu_1^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{1}{\kappa_{\nu}} \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_i} \right) + \kappa_{\nu} \varphi_1 = \kappa_{\nu} 4\pi B(\nu, T), \quad (4.15)$$

$$\forall \nu > \nu_1 : \quad -\mu_2^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{1}{\kappa_{\nu}} \frac{\partial \varphi_2}{\partial x_i} \right) + \kappa_{\nu} \varphi_2 = \kappa_{\nu} 4\pi B(\nu, T). \quad (4.16)$$

Der Strahlungsfluss wird nun mittels (4.16) berechnet:

$$\varphi = \frac{\gamma_2 \varphi_1 + \gamma_1 \varphi_2}{\gamma_2 - \gamma_1}. \quad (4.17)$$

Die Konstanten für das SP<sub>3</sub>-Modell sind wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{1}{30} \left( 5 + (-1)^n \sqrt{\frac{5}{6}} \right) \\ \mu_n^2 &= \frac{1}{7} \left( 3 + 2(-1)^n \sqrt{\frac{6}{5}} \right) \\ \gamma_n &= \frac{5}{7} \left( 3 + 3(-1)^n \sqrt{\frac{6}{5}} \right). \end{aligned} \quad (4.18)$$

$\nu$  bezeichnet den Frequenzbereich in welchem die Strahlungsgleichungen gelöst werden müssen.

Der Anfangspunkt für die Herleitung der Randbedingungen für die SP<sub>N</sub> Approximationen ist die Gleichung für die semi-transparenten Randbedingungen der Strahlungsintensität. Für  $x \in \partial V$  und  $\Omega \in S^2$

$$I(x, \Omega) = \rho_r(n \cdot \Omega) I(\Omega', x) + [1 - \rho_r(n \cdot \Omega)] B(T_b), \quad \forall n \cdot \Omega < 0, \quad (4.19)$$

wobei  $\Omega' = \Omega - 2(n \cdot \Omega)n$  die spekulare Reflektion der Fläche  $\partial V$  ist. Der erste Term der rechten Seite bezeichnet die reflektierte Strahlung und der zweite Term steht für die Strahlung von außen. Nach der Integration über  $n \cdot \Omega$  bekommt man für das SP<sub>1</sub>-Modell folgende Randbedingungen für  $\varphi$ :

$$\forall \nu > \nu_1 : \varphi + \frac{(1 + 3r_2)}{(1 - 2r_1)} \frac{2}{3\kappa} \frac{\partial \varphi}{\partial n} = 4\pi B(T_b, \nu). \quad (4.20)$$

Zur Definition von  $r_1$  und  $r_2$  müssen folgende Integrale berechnet werden:

$$\begin{aligned} r_1 &= \int_0^1 \mu \rho_r(-\mu) d\mu \\ r_2 &= \int_0^1 \mu^2 \rho_r(-\mu) d\mu. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Die Reflektivität  $\rho_r$  wurde als

$$\rho_r = \frac{1}{2} \left[ \frac{\tan^2(\theta_1 - \theta_2)}{\tan^2(\theta_1 + \theta_2)} + \frac{\sin^2(\theta_1 - \theta_2)}{\sin^2(\theta_1 + \theta_2)} \right] \quad (4.22)$$

definiert.

Die Randbedingungen für  $\varphi_1$  und  $\varphi_2$  im SP<sub>3</sub> Modell lauten:

$$\forall \nu > \nu_1 : \alpha_1 \varphi_1 + \frac{1}{\kappa} \frac{d\varphi_1}{dn} = -\beta_2 \varphi_2 + \eta_1 B(T_b, \nu), \quad (4.23)$$

$$\forall \nu > \nu_1 : \alpha_2 \varphi_2 + \frac{1}{\kappa} \frac{d\varphi_2}{dn} = -\beta_1 \varphi_1 + \eta_2 B(T_b, \nu), \quad (4.24)$$

wobei

$$\alpha_1 = \frac{C_1 D_4 - C_4 D_1}{C_3 D_4 - D_3 C_4}, \quad \alpha_2 = \frac{C_3 D_2 - C_2 D_3}{C_3 D_4 - D_3 C_4},$$

$$\beta_1 = \frac{C_3 D_2 - C_1 D_3}{C_3 D_4 - D_3 C_4}, \quad \beta_2 = \frac{C_2 D_4 - C_4 D_2}{C_3 D_4 - D_3 C_4},$$

$$\eta_1 = \frac{D_4 \rho_1 - C_4 \rho_3}{C_3 D_4 - D_3 C_4}, \quad \eta_2 = \frac{C_3 \rho_3 - D_3 \rho_1}{C_3 D_4 - D_3 C_4},$$

$$D_1 = \omega_0(\gamma_2 B_1 - B_2), \quad D_2 = \omega_0(-\gamma_1 B_1 + B_2),$$

$$D_3 = \omega_0(\gamma_2 B_3 - B_4), \quad D_4 = \omega_0(-\gamma_1 B_3 - B_4),$$

$$C_1 = \omega_0(\gamma_2 A_1 - A_2), \quad C_2 = \omega_0(-\gamma_1 A_1 + A_2),$$

$$C_3 = \omega_0(\gamma_2 A_3 - A_4), \quad C_4 = \omega_0(-\gamma_1 A_3 - A_4),$$

$$B_1 = -\frac{1+8r_5}{16}, \quad B_2 = \frac{5(1-8r_6)}{16},$$

$$B_3 = \frac{3r_4}{6}, \quad B_4 = r_4 + \frac{3}{14}(1+7r_7)$$

$$A_1 = \frac{1-2r_1}{4}, \quad A_2 = \frac{5(1-8r_3)}{16}, \quad A_3 = \frac{1+3r_2}{6}, \quad A_4 = r_4 + \frac{2}{9}(1+3r_2),$$

$$\omega_0 = \frac{7}{36} \sqrt{\frac{6}{5}},$$

$$r_2 = \int_0^1 \mu^2 \rho_r(-\mu) d\mu, \quad r_4 = \int_0^1 \mu P_3(\mu) \rho_r(-\mu) d\mu,$$

$$r_5 = \int_0^1 P_3(\mu) \rho_r(-\mu) d\mu, \quad r_6 = \int_0^1 P_2(\mu) P_3(\mu) \rho_r(-\mu) d\mu,$$

$$r_7 = \int_0^1 P_3(\mu) P_3(\mu) \rho_r(-\mu) d\mu,$$

$$\rho_1 = (1-2r_1)\pi,$$

$$\rho_3 = -\left(\frac{1}{4} - 2r_5\right)\pi$$

(4.25)

Detaillierte Information zur Herleitung der Randbedingungen für die  $SP_N$  Approximationen können in [127] erhalten werden.

Die  $SP_N$ - Transportgleichung sowie die  $P_N$  –Transportgleichung sind elliptische Differentialgleichungen. Somit besitzen sie die gleiche mathematische Struktur wie die Energiegleichung. Das bedeutet, dass diese Transportgleichungen mit denselben numerischen Methoden zur Ortsdiskretisierung und Lösung wie die Transportgleichung für Energie und Impuls behandelt werden können. Dies ist vor allem in bezug auf die Kopplung des Strahlungsprogramms mit immer komplexer werdenden Verbrennungsprogrammen von unschätzbarem Vorteil.

#### **Beschreibung der spektralen Abhängigkeit**

Die Wellenlängenabhängigkeit (bzw. Frequenzabhängigkeit) des Strahlungswärmeübergangs in Gasturbinenbrennkammern wird durch die spektralen Strahlungseigenschaften von Ruß, Verbrennungsgasen ( $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $CO$  und unverbrannter Kohlenwasserstoffe) und den Brennkammerwänden bestimmt. Die Messungen der Strahlungsspektren in den verschiedenen Zonen der Gasturbinenbrennkammer zeigen, dass in der Primärzone mit der höchsten Strahlungsbelastung der Brennkammerwand zu rechnen ist, da dort das Integral der Strahlungsintensität über der Wellenlänge am größten ist. In diesem Brennkammerbereich wird der größte Teil der Reaktionswärme freigesetzt und die größten Konzentrationen des Reaktionszwischenproduktes Ruß sind dort zu finden. Das Strahlungsspektrum der Primärzone ist durch einen stark dominanten Anteil der Kontinuumsstrahlung des Rußes gegenüber der Bandstrahlung der Gase gekennzeichnet. Im Sekundär-Mischzonenbereich hingegen überwiegt aufgrund der in diesen Zonen weitaus größeren Konzentrationen der Reaktionsendprodukte  $CO_2$  und  $H_2O$  und der durch Oxidationsreaktionen bereits stark reduzierten Rußkonzentrationen die Strahlung der Gasbanden.

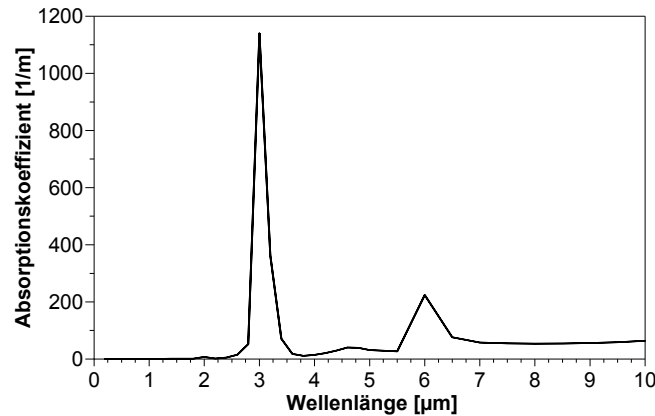
In allgemein anwendbaren Rechenverfahren müssen deshalb sowohl das Strahlungsverhalten von Ruß als auch der Verbrennungsgase genau repräsentiert werden.

#### **Strahlungseigenschaften von Gasen**

Verbrennungsgase absorbieren und emittieren im Gegensatz zu Ruß nicht kontinuierlich über den Wellenlängenbereich, sondern nur in beschränkten Wellenlängenintervallen, den sogenannten Strahlungsbanden.

In dem in dieser Arbeit vorgestellten Strahlungsmodell wird das Strahlungsaktivenspektrum auf mehrere Banden  $N_\nu$  mit einem von der

Gasmischung und Wellenlängen abhängigen Absorptionskoeffizienten aufgelöst ( $\kappa_{v,Gas} = f(\lambda, p_{gas})$ ). Die Abbildung 4.4 stellt die Abhängigkeit der Absorptionskoeffizienten von der Wellenlänge für Wasser dar.



**Abbildung 4.4:** Abhängigkeit des Absorptionskoeffizienten von Wasser von der Wellenlänge (Siegel [118])

Aus dem Experiment bekannte Spektralbereiche der wichtigsten Strahlungsbanden für Kohlwasserstoffflammen sind:

Für Wasser: 2,7 µm, 6,3 µm  
Für Kohlendioxid: 2,7 µm, 4,3 µm  
Für Kohlenmonoxid: 4,7 µm.

#### Strahlungseigenschaften von Ruß

Eine genaue Vorhersage der Strahlungseigenschaften von Ruß kann aus der elementaren Theorie elektromagnetischer Wellen durch Lösung der Maxwell'schen Gleichungen bestimmt werden. Für diese Vorhersage müssen die Größe, die Form und auch die optischen Eigenschaften der Rußpartikel bekannt sein. Leider können mit den heute zur Verfügung stehenden optischen Messverfahren diese Informationen nicht detailliert ermittelt werden. Außerdem bedeutet die vollständige Lösung der Maxwell'schen Gleichungen zur Beschreibung der Rußstrahlung einen sehr großen Rechenaufwand.

Üblicherweise wird in der Praxis von einer sphärischen Form der Rußpartikel ausgegangen. Hierfür ist die analytische Lösung der Maxwell'schen Gleichungen bekannt. Sie wird als Mie-Theorie [79] bezeichnet. Aus der Mie-Theorie sind die Rußstrahlungseigenschaften von dem Parameter  $\alpha = \pi d_s / \lambda$  ( $d_s$  ist der Partikeldurchmesser) und von dem komplexen Brechungsindex  $m = n - ik$ , wobei  $n$  ist der Realteil des Brechungsindex und  $k$  ist die Imaginärteil des Brechungsindex, die eine Funktion der Wellenlänge sind, abhängig. Für  $\alpha \ll 1$  reduziert sich die Mie-

Gleichung zum Rayleigh-Limit und der Absorptionskoeffizient von Ruß wird kann mit (4.26) berechnet werden

$$\kappa_{Ru\beta, ext, Rayleigh} = \frac{\pi}{\lambda} \cdot f_v \cdot \frac{36 nk}{(n^2 + k^2)^2 + 4(n^2 - k^2)^2 + 4} \quad (4.26)$$

In (4.26) bezeichnet  $f_v$  die Rußvolumenfraktion. Die Bestimmung von der Rußvolumenfraktion wird in der Kapitel 4.2 diskutiert.

Die experimentelle Untersuchungen zeigen jedoch, dass Rußemission als Wellenlängen unabhängig angenommen werden kann. Der Absorptionskoeffizient kann nach [137] bestimmt werden:

$$\kappa_{Ru\beta} = 3.6 \frac{C_0}{C_2} f_v T, \quad (4.27)$$

wobei  $C_2$  die zweite Planck'sche Konstante ist  $C_2=1.4388 [cm K]$ ,  $C_0=4.64$  und  $T$  ist die Temperatur.

Unter der Annahme, dass die Strahlung von Ruß grau ist und der Absorptionskoeffizient in jedem Wellenlängenbereich gleich ist, gilt für den Absorptionskoeffizient in den Gleichungen (4.12), (4.14), (4.15)

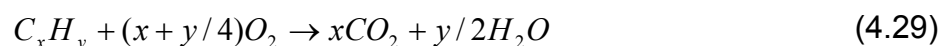
$$\kappa_v = \kappa_{v, Gas} + \kappa_{Ru\beta} \quad (4.28)$$

### Strahlungseigenschaften von Wandmaterialien

Die Strahlungseigenschaften von Brennkammerwänden, die für eine genaue Angabe der Randbedingungen des Strahlungswärmeübergangs benötigt werden, werden im allgemeinen durch das Emissionsverhältnis bzw. Reflexionsverhältnis repräsentiert. Generell ist das Emissionsverhältnis von der Wellenlänge, der Oberflächentemperatur und der Abstrahlrichtung abhängig.

### 4.2 Ruß

Die Verbrennung von Kohlenwasserstoffen unter idealen Bedingungen führt zu Wasser und Kohlendioxid und kann mit der Reaktion (4.29) ausgedrückt werden.



Diese Bedingungen garantieren eine maximale Wärmefreigabe und ein Maximum chemischer Energie für mechanische Arbeit. In technischen Anwendungen, wie in Gasturbinen, industriellen Öfen oder Verbrennungsmotoren werden diese Bedingungen oft nicht erfüllt. Wenn der Oxidatorgehalt zur Erfüllung der in (4.29)



stehenden Bedingungen nicht genug ist, tauchen in der (4.29) zusätzliche Verbrennungsprodukte wie Kohlenmonoxide, Wasserstoff, Kohlenwasserstoffe und Ruß auf. Neben dem Problem des reduzierten Wirkungsgrades infolge unvollständiger Verbrennung ist der Prozess der Rußbildung von großer Bedeutung. Bei der Verbrennung ist Ruß ein unerwünschtes Endprodukt (z.B. bei Dieselmotoren wegen der Möglichkeit der Absorption von krebserregenden Polyaromaten). Andererseits ist Ruß als Zwischenprodukt in Feuerungsprozessen erwünscht, da er durch Strahlung einen Großteil der notwendigen Wärmeübertragung bewerkstelligt. Ruß wird auch in vielen industriellen Prozessen verwendet, wie z.B. bei der Herstellung von Druckerschwärze oder als Füllmaterial in Reifen.

Ruß entsteht beim Wachsen polyzyklischer aromatischer Kohlenwasserstoffe.

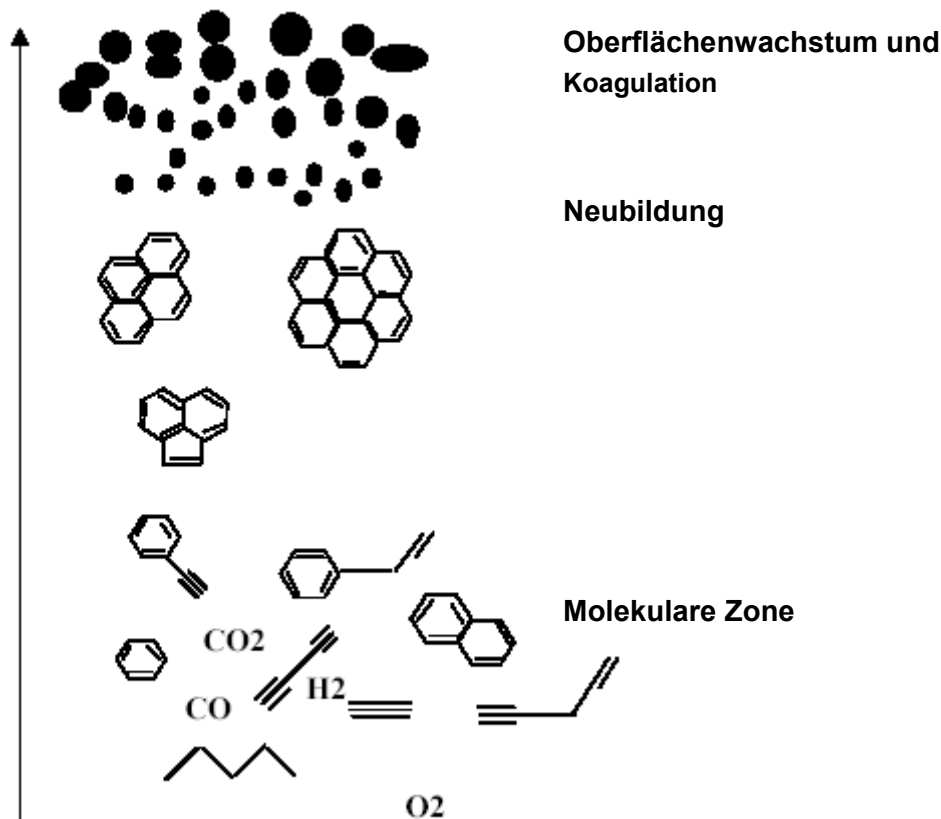
Der Prozess der Rußbildung kann formal in Neubildung, Koagulation und Oberflächenwachstum der Rußteilchen untergliedert werden. Unter Teilchenneubildung versteht man die Bildung erster nachweisbarer Rußteilchen aus der Gasphase. Unmittelbar nach der Entstehung der Rußteilchen laufen gleichzeitig Teilchenkoagulation und Oberflächenwachstum ab. Koagulation führt zur Abnahme der Teilchendichte und zur Zunahme des Teilchenradius, liefert aber keinen Beitrag zur Erhöhung der Gesamtrußmenge in der Flamme. Der Verlauf der Rußkonzentration in der Flamme wird also durch Teilchenneubildung und Oberflächenwachstum bestimmt. Das Oberflächenwachstum ist eine heterogene Reaktion von Komponenten aus der Gasphase mit den Rußteilchen. Die durch Oberflächenwachstum gebildete Rußmenge ist um ein vielfaches größer als jene, die durch Teilchenneubildung erhalten wird. Die Rußbildung ist ein sehr komplizierter Prozess, deren Beschreibung mittels detaillierter Chemie ungefähr 250 Elementarreaktionen mit ca. 50 Spezies benötigt.

In technisch relevanten Systemen werden Modelle benutzt, wobei der Prozess der Rußbildung und Oxidation mit einer kleinen Zahl von Variablen beschrieben wird. Zur Modellierung der Rußbildung wird, ausgehend von Moss und Stewart [81], ein Zweigleichungsmodell für Rußvolumenanteil ( $f_v$ ) und Partikeldichte ( $N_s$ ) benutzt, wobei die Prozesse Neubildung, Koagulation und Oberflächenwachstum und Oxidation in einer vereinfachten Form dargestellt werden.

$$\frac{d\left(\frac{N_s}{N_A}\right)}{dt} = \underset{\text{Nukleation}}{\alpha} - \underset{\text{Koagulation}}{\beta\left(\frac{N_s}{N_A}\right)^2}, \quad (4.30)$$

$$\frac{d(f_v)}{dt} = \underset{\text{Oberflächenwachstum}}{\gamma(f_v)^{1/2} N^{1/3}} + \underset{\text{Nukleation}}{\delta} - \underset{\text{Oxidation}}{\xi} \quad (4.31)$$

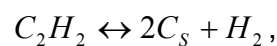
wobei  $N_A$  die Avogadrozahl ist und  $\rho_s$  ist die Rußdichte ( $1800\text{kg/m}^3$ ). Unterschiedliche Strategien beschreiben mehr oder weniger genau die oben genannten Prozesse.



**Abbildung 4.4:** Rußbildung in homogener Mischung.

#### 4.2.1 Modellierung der Rußbildung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Modell von Lindstedt und Lee [68] implementiert. Dieses Modell ist gut geeignet zur Modellierung von Ruß in Methan-, Propan- und Acetylenflammen. Als Indikator für Rußpartikelneubildung und Oberflächenwachstum wird die Konzentration von Acetylen angenommen:



wobei  $C_s$  die Rußmoleküle bezeichnet. Der Nukleationsterm in (4.30) wird entsprechend (4.32) formuliert.

$$\alpha = 2 \cdot 6.3 \cdot 10^3 [C_2H_2] \exp(-21100/T) / n_c \quad (4.32)$$

$n_c$  ist die Zahl der für die Bildung eines Rußpartikel benötigten Acetylenmoleküle.

Der Koagulationsterm ist mit der sogenannten Kollisionszahl  $\beta$  beschrieben, die eine Funktion des Partikeldurchmessers  $d_p$ , der Rußdichte  $\rho_s$ , des Oberflächenkoeffizienten  $\sigma_b$  und der Temperatur ist:

$$\beta = 2 \cdot 9 d_p^{1/2} \left( \frac{6 \sigma_b T}{\rho_s} \right)^{1/2} \rho^2 \approx 1 \cdot 10^7 (T)^{1/2}. \quad (4.33)$$

Für den Nukleationsterm in (4.31) gilt

$$\delta = 2 \cdot 6.3 \cdot 10^3 \exp(-21100/T) [C_2 H_2] \frac{M_s}{\rho_s}. \quad (4.34)$$

Hierbei steht  $M_s$  für die Rußmolarmasse ( $1.8 \text{ g/cm}^3$ ).

Der Koeffizient bei dem Oberflächenwachstumsterm wird folgendermaßen dargestellt:

$$\gamma = 2 \cdot 7.5 \cdot 10^3 \exp(-12100/T) [C_2 H_2] M_s. \quad (4.35)$$

Der Oxidationsterm in (4.31) ist eine Funktion von der Konzentrationen von  $OH$  und  $O_2$ , der Temperatur und den Reaktionskonstanten:

$$\xi = (7.15 \cdot 10^2 T^{1/2} \exp(19800/T) [O_2] M_s + 0.36 T^{1/2} [OH]) N^{1/3} / f_v^{2/3}. \quad (4.36)$$

Die Gleichungen (4.30) und (4.31) besitzen neben dem Zeit- und Quellterm einen Konvektions- und Diffusionsterm. Im Fall der turbulenten Verbrennung müssen die Quellterme in (4.30) und (4.31) über eine PDF integriert werden.

$$\frac{\partial \tilde{N}_s / N_A}{\partial t} = \int \frac{\partial N_s / N_A}{\partial t} \tilde{P}(\xi, Y_\alpha, g), \quad (4.37)$$

$$\frac{\partial (\tilde{f}_v)}{\partial t} = \int \frac{\partial f_v}{\partial t} \tilde{P}(\xi, Y_\alpha, g). \quad (4.38)$$

### 4.3 Validierung des Strahlungsmodells

Die oben dargestellten Verfahren zur Simulation des Wärmeübergangs durch Strahlung wurde in den FASTEST-Code implementiert. Zur Validierung des Modells werden im weiteren zwei Testfälle dargestellt.

Der erste Testfall demonstriert die Strahlungsverteilung zwischen Wänden konstanter Temperatur und einem absorbierenden Medium mit konstantem Absorptionskoeffizienten  $\kappa=1$ . Das Rechengebiet stellt ein Quadrat mit der Seitenlänge  $L=1\text{m}$  dar, die mit jeweils 100 Punkten in beiden Richtungen aufgelöst ist. Die Reflektivität der Wände ist  $\rho=0$ . Die Abbildung 4.5 stellt die Temperaturrandbedingungen dar. Die Ergebnisse in Abbildung 4.6 zeigen einen Vergleich der mittleren Strahlungsintensität für das vorgegebene Temperaturfeld zwischen  $\text{SP}_1$ -Modell,  $\text{SP}_3$ -Modell und den Ergebnissen für die Strahlungsintensität, die mit der Gleichung (4.1) berechnet wurden. Die Abbildung 4.7 stellt einen Vergleich der mittleren Strahlungsintensität für das gekoppelte System (Energiegleichung + Strahlungstransport) zwischen  $\text{SP}_1$ -Modell,  $\text{SP}_3$ -Modell und den Ergebnissen für Strahlungsintensität, die mit der Gleichung (4.1) berechnet wurden, dar. Das  $\text{SP}_3$ -Modell liefert gute Übereinstimmung mit der exakten Lösung in beiden Fällen.

Ein weiteres Beispiel stellt die Simulation einer Wasserstoff-Luft Flamme in einer Brennkammer mit gekühlten Wänden dar. Diese Brennkammer wurde von Hartick [36] untersucht.

Die Brennkammer stellt ein Zylinder mit dem Durchmesser von 0.3 m dar. Der Durchmesser der Brennstoffdüse ist  $d_{\text{H}_2}=20\text{mm}$ , von der Luftring ist  $d_{\text{Luft}}=40\text{mm}$ . Die Länge der Brennkammer ist 1m. Der Brenner wurde mit thermischer Leistung von 20KW bei einem Luftverhältnis 1.21 betrieben. Die mit dem Düsendurchmesser gebildete Austritts-Reynolds-Zahl des Wasserstoffs beträgt  $\text{Re}_{\text{H}_2}=2500$ . Die mit äußeren Ringspalt Durchmesser gebildete Austritts-Reynolds-Zahl des Luftstroms ist  $\text{Re}_{\text{Luft}}=3200$ . Die Wandtemperatur wurde konstant ( $T_w=700\text{K}$ ) angenommen. Das Rechengebiet wurde mit ca.60000 Kontrollvolumen aufgelöst.

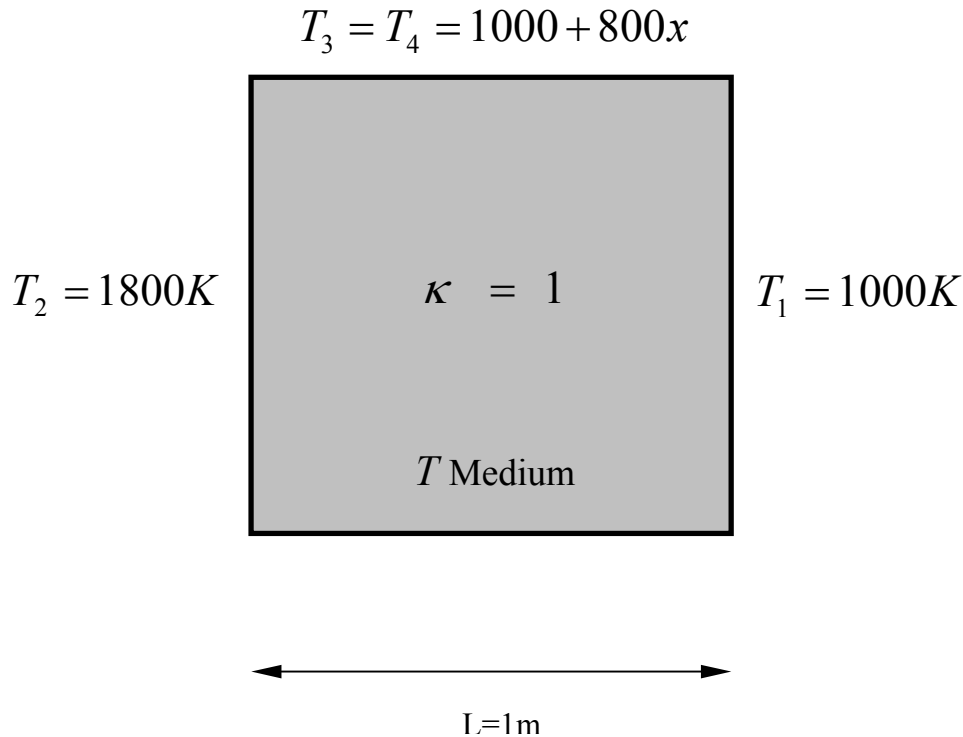
Die Strahlungsflussgleichungen wurden für drei Frequenzbände gelöst (siehe Tabelle 4.1).

**Tabelle 4.1:** Frequenzbänderbereich für Testfall 2.

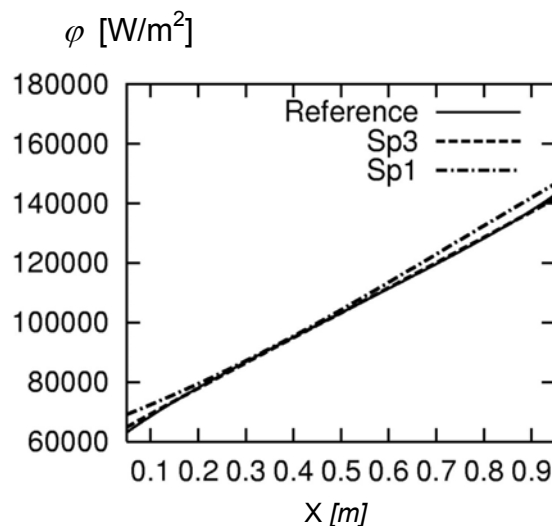
Band	$\nu_1$	$\nu_2$
1	$2 \cdot 10^{14}$	$1.2 \cdot 10^{14}$
2	$1.2 \cdot 10^{14}$	$7.5 \cdot 10^{13}$
3	$7.5 \cdot 10^{13}$	$4.5 \cdot 10^{13}$

Die Abbildung 4.8 stellt die axialen Verläufe der mittleren Temperatur für verschiedene Strahlungsmodelle verglichen mit den Messdaten von Hartick [36] dar.

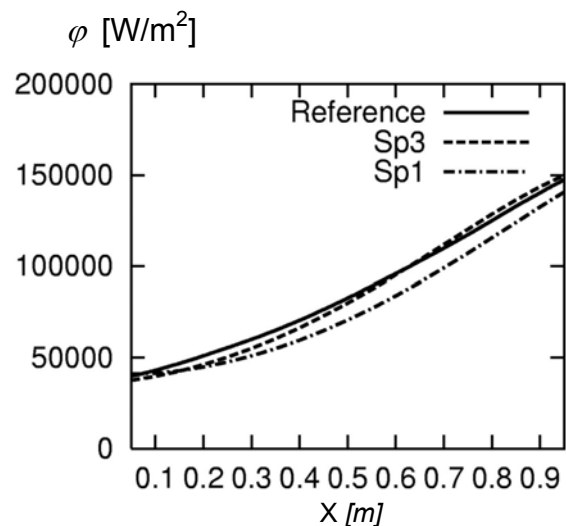
In diesem Fall zeigen beide Strahlungsmodelle gute Übereinstimmung mit den Messdaten. Die Abbildung 4.9 demonstriert den Einfluss der Strahlung auf die Temperaturverteilung in der Brennkammer anhand des Vergleichs zwischen dem SP<sub>1</sub>-Modells und der adiabaten Lösung.



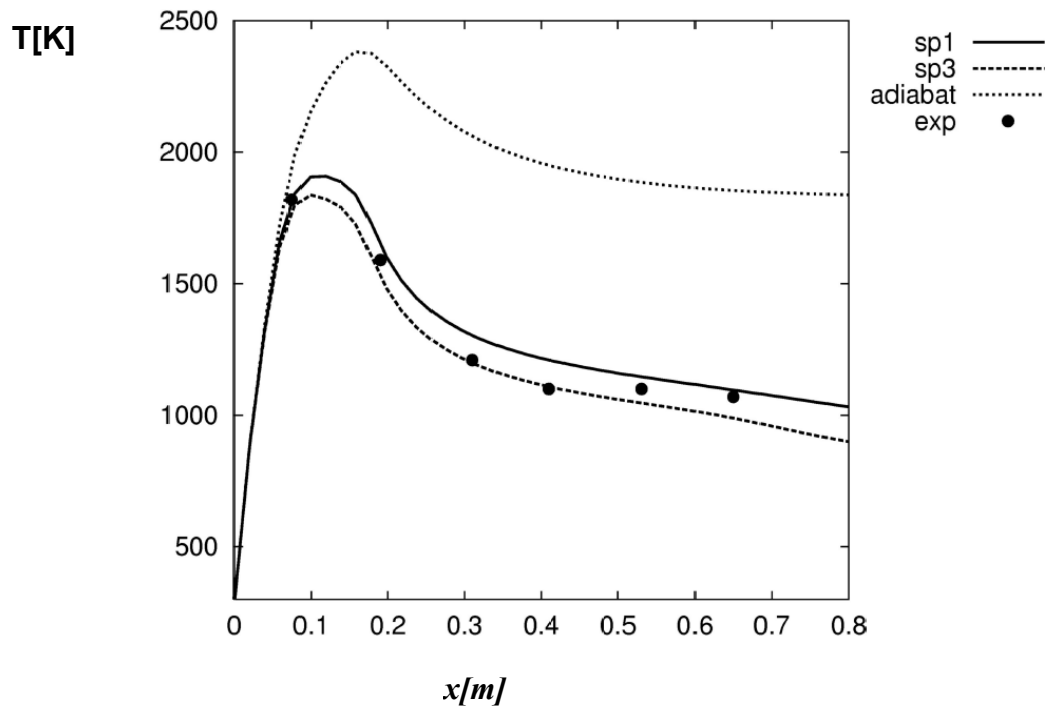
**Abbildung 4.5:** Testfall 1.



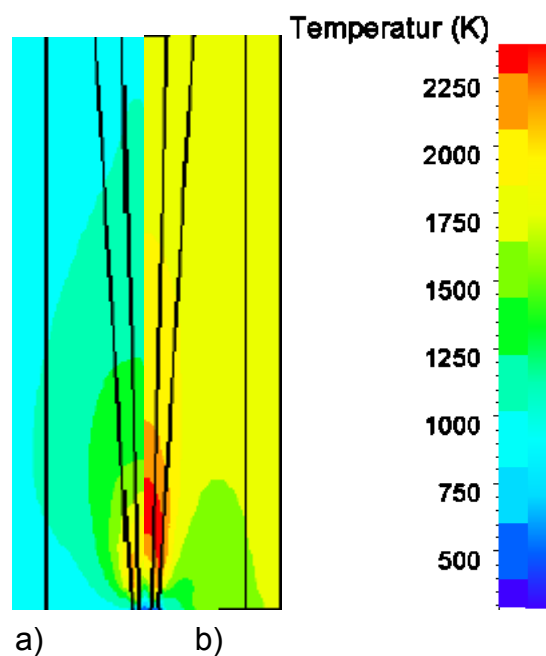
**Abbildung 4.6:** Strahlungsfluss für das gekoppelte Energie-Strahlung System.



**Abbildung 4.7:** Strahlungsfluss imkonstanten Temperaturfeld



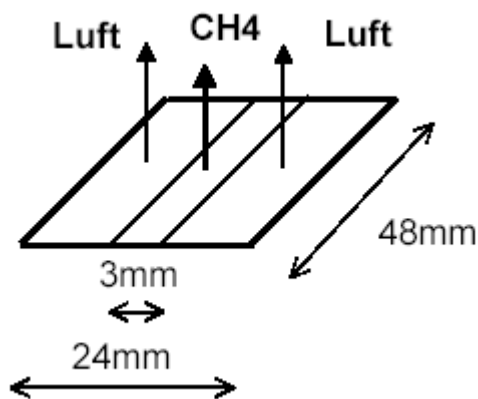
**Abbildung 4.8:** Verlauf der axialen Temperatur mit verschiedenen Strahlungsmodellen.



**Abbildung 4.9:** Qualitativer Vergleich der Temperaturfelder: a) SP<sub>1</sub>-Modell; b) Adiabat.

### 4.4 Validierung des Rußmodells

Die Plausibilität des Modells wurde anhand einer laminaren Methan-Luft Diffusionsflamme überprüft. Die Brennerkonfiguration ist in der Abbildung 4.10 dargestellt. Die mittlere Austrittsgeschwindigkeit von Methan ist  $\tilde{u}_{CH_4} = 7.4 \text{ cm/s}$ , die mittlere Austrittsgeschwindigkeit von Luft ist  $\tilde{u}_{Luft} = 19.1 \text{ cm/s}$ .

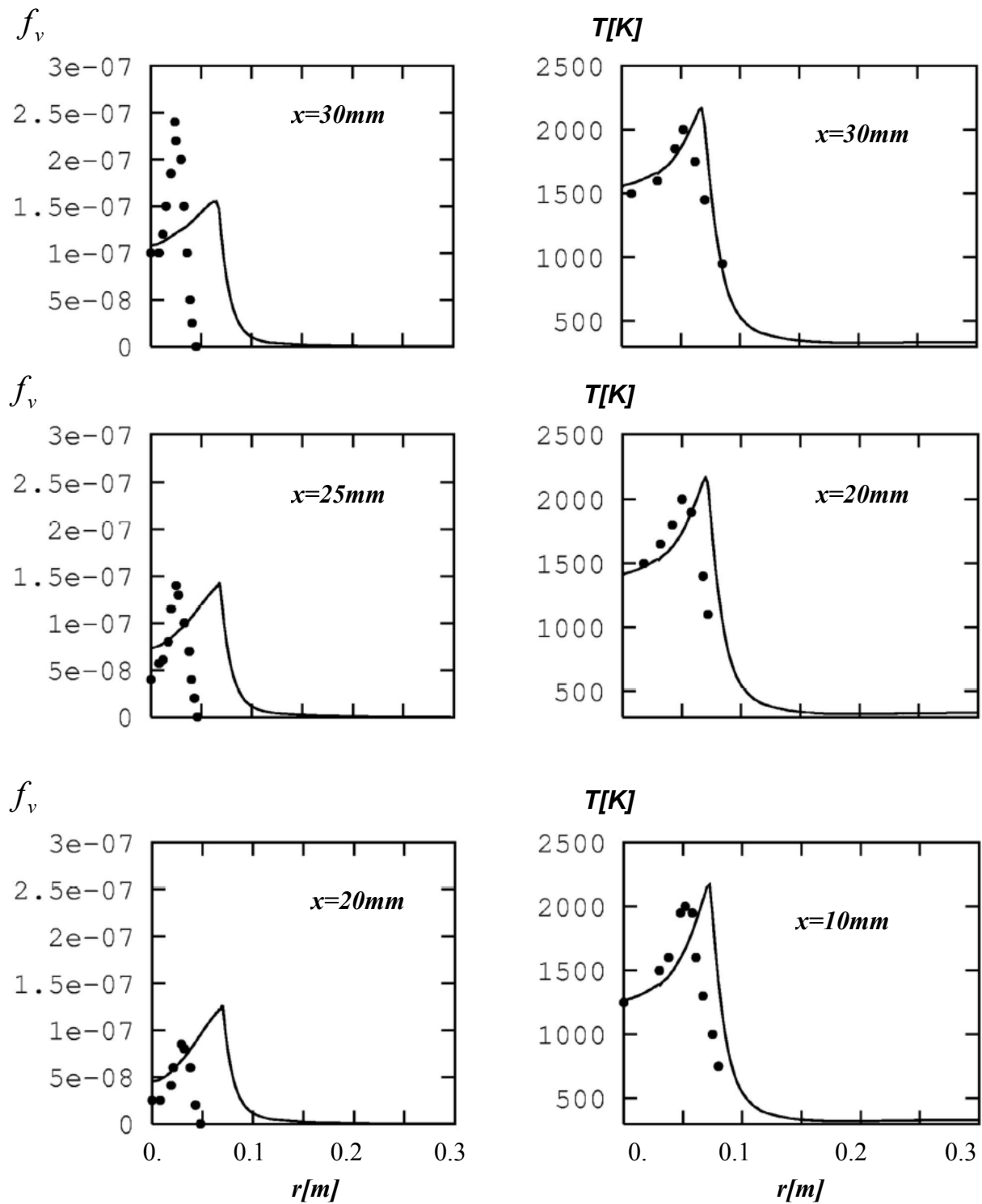


**Abbildung 4.10:** Konfiguration des Slotbrenners

Mehr Information zur diesen Konfiguration kann in der Arbeit [126] gefunden werden. Die Kopplung des Rußmodells mit einem ILDM-Chemiemechanismus zur Bestimmung der benötigten Konzentrationen ist notwendig, da die unendlich schnelle Chemie nicht in der Lage ist, diesen Vorgang richtig zu ermöglichen. In dieser Arbeit wurde die ILDM-Bibliothek von Maas, Universität Stuttgart verwendet um die Konzentrationen zu bestimmen.

In der Abbildung 4.11 sind die Ergebnisse experimenteller Untersuchungen und Simulation gegenüber gestellt. Die Daten für den Rußvolumenbruch  $f_v$  sind für die Ebene 20, 25 und 30mm vorhanden. Die Temperaturprofile wurden in den Ebenen 10, 20 und 30mm verglichen.

Die berechneten Temperaturprofile stimmen mit den Messdaten überein, wobei der Rußvolumenbruch nicht genau wiedergegeben werden konnte. Die axialen Werte des Rußvolumenbruchs wurden nahezu gut vorhergesagt, doch die Lage des Maximums und die quantitativen Ergebnisse, insbesondere in der Ebene  $x=30\text{mm}$ , weichen von den Messergebnissen ab.

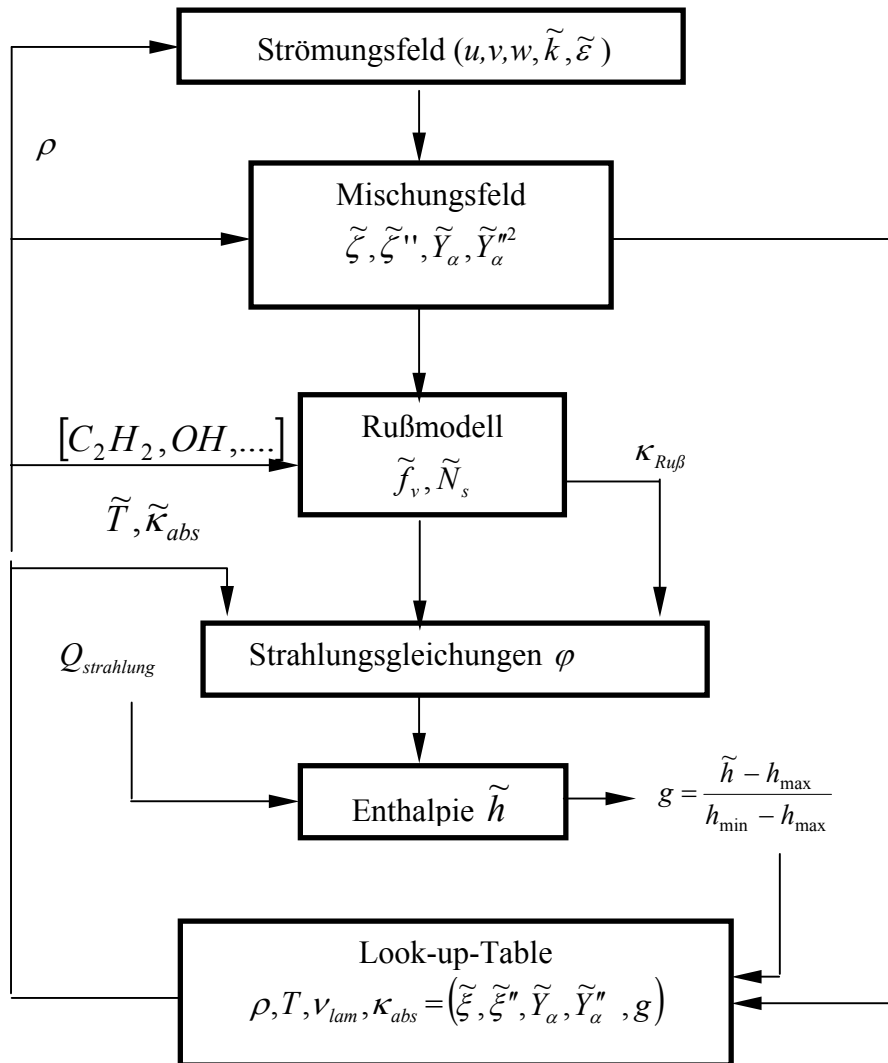


**Abbildung 4.11:** Radiale Profile des Rußvolumenbruches und der Temperatur für verschiedene axiale Positionen. Linie-Simulation; Punkte- Experiment.



#### 4.5 Kopplung der Modelle: Zusammenfassung

In diesem Abschnitt wird die Interaktion der oben beschriebenen Modelle schematisch dargestellt. Die Abbildung 4.12 veranschaulicht die Schließung und numerische Implementierung dieser Modelle.



**Abbildung 4.12:** Ergänzung des Verbrennungsmodul mit dem Ruß- und Strahlungsmodell

# 5 Numerisches Lösungsverfahren

Die in den vorherigen Kapiteln beschriebene Modellierung der turbulenten Verbrennung verlangt die numerische Lösung des entstandenen Gleichungssatzes, eines Systems nichtlinearer, partieller Differentialgleichungen. Die Details des numerischen Verfahrens werden im Folgenden beschrieben. Hierbei lassen sich die folgenden Unterpunkte formulieren:

- Generierung eines numerischen Gitters,
- Diskretisierung der in allen Gleichungen enthaltenen Terme auf diesem Gitter,
- Aufstellen des algebraischen Gleichungssystems,
- Lösung des Gleichungssystems.

In Rahmen dieser Arbeit wurde das Programmpaket FASTEST-3D (**F**low **A**nalysis **S**olving **T**ransport **E**quations **S**imulating **T**urbulence **3** **D**imensional) eingesetzt. Die Eigenschaften des CFD Codes FASTEST sind im Folgenden aufgeführt:

- Finite Volumen Diskretisierungsmethode
- Strukturierte Hexaeder
- Körperangepasstes nicht-orthogonales blockstrukturiertes Gitter mit zellenorientierter Anordnung der Variablen
- Implizites und Semi-implizites Zeitdiskretisierungsverfahren
- Verfahren erster und zweiter Ordnung für Raumdiskretisierung
- Implizites Verfahren für die iterative Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems
- Mehrgitterverfahren
- Parallelisierung

In den nachfolgenden Abschnitten werden die in dieser Arbeit angewendeten Diskretisierungs- und Lösungsverfahren im Detail vorgestellt. Ausführliche Beschreibungen dieser Techniken finden sich unter anderem in Ferziger und Peric [23], Schäfer [93].

## 5.1 Diskretisierung der Bilanzgleichungen

### 5.1.1 Finite Volumen Methode

Die verallgemeinerte Transportgleichung eines Skalars  $\varphi$  lässt sich in ihrer integralen Form folgendermaßen darstellen

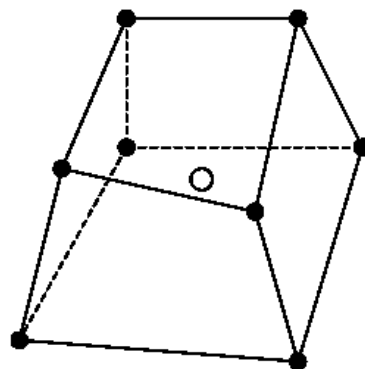
$$\underbrace{\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho \varphi) dV}_{\text{Instationärterm}} + \underbrace{\int_V \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i \varphi) dV}_{\text{Konvektion}} = \underbrace{\int_V \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right) dV}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{\int_V S_\varphi dV}_{\text{Quellterm}}. \quad (5.1)$$

$\varphi$  vertritt die jeweilige Variable  $U, V, W, \xi, Y_\alpha, f_v, N_s$  u.s.w. Die Gleichung setzt sich aus einem instationären, einem konvektiven und einem diffusiven Term mit dem Transportkoeffizienten  $\Gamma_\varphi$  (laminare oder turbulente Viskosität, Diffusion, usw.) zusammen.  $S_\varphi$  ist die Summe aller Quell- und Senkterme. Nach Anwendung des Gauß'schen Satzes kann das Volumenintegral der Konvektion und Diffusion in ein Oberflächenintegral umgewandelt werden, so dass (5.1) folgende Form

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho \varphi) dV + \int_\sigma \left( \rho u_i \varphi - \Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right) n_i d\sigma = \int_V S_\varphi dV \quad (5.2)$$

erhält.

Dabei ist  $\sigma$  die Oberfläche des Volumen  $V$  ist und  $n_i$  ist die Projektion des nach außen gerichteten Normalvektors  $\vec{n}$  der Oberfläche  $V$  auf die  $x_i$  Achse. Das Rechengebiet muss auf eine endliche Anzahl Kontrollvolumina (KV) zerlegt werden und die Gleichung (5.2) wird in jedem KV gelöst. Das Programm FASTEST-3D benutzt Hexaeder als Form des Kontrollvolumens mit zellenorientierter Anordnung der Variablen (Abb.5.1).



**Abbildung 5.1** Ein nicht orthogonaler Hexaeder.  $\circ$  – Zellenmitte,  $\bullet$  – Gitterknoten.

Eine der wichtigsten Eigenschaften der Finite-Volumen-Methode ist die Konservativität des Verfahrens, so dass die Erfüllung der Erhaltungseigenschaften der Differentialgleichungen in ihrer diskretisierten Form gewährleistet ist.

### 5.1.2 Diskretisierungsverfahren

#### Koordinatentransformation

Zuerst werden die lokalen Koordinaten eingeführt. Die in Abbildung 5.2 dargestellten globalen (Kartesische) Koordinaten  $(x_1, x_2, x_3)$  werden in lokale Koordinaten  $(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3)$  transformiert. Die Transformationsmatrix hat die folgende Form:

$$A = \begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial \zeta_1} & \frac{\partial x_1}{\partial \zeta_2} & \frac{\partial x_1}{\partial \zeta_3} \\ \frac{\partial x_2}{\partial \zeta_1} & \frac{\partial x_2}{\partial \zeta_2} & \frac{\partial x_2}{\partial \zeta_3} \\ \frac{\partial x_3}{\partial \zeta_1} & \frac{\partial x_3}{\partial \zeta_2} & \frac{\partial x_3}{\partial \zeta_3} \end{pmatrix} \quad (5.3)$$

Für die Ableitung ergibt die Koordinatentransformation folgende Darstellung:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x_i} = \frac{\partial \varphi}{\partial \zeta_j} \frac{\partial \zeta_j}{\partial x_i} = \frac{\partial \varphi}{\partial \zeta_j} \frac{1}{J} [A_{adj}]^T = \frac{\partial \varphi}{\partial \zeta_j} \frac{\beta^{ij}}{J}, \quad (5.4)$$

wobei  $J = \det A$  Jakobian ist,  $(A_{adj})^T = \left[ adj \left( \frac{\partial x_j}{\partial \zeta_i} \right) \right]^T$  ist transponierte adjungierte

Matrix, die aus Matrix A sich ergibt und  $\beta^{ij}$  ist ein Element der Matrix B.

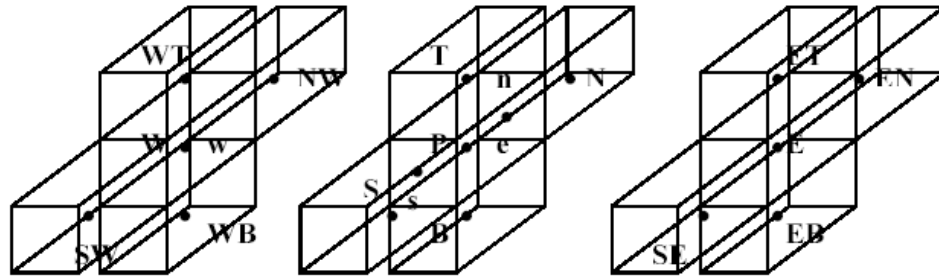
$$B = \begin{pmatrix} \frac{\partial x_2}{\partial \zeta_2} \frac{\partial x_3}{\partial \zeta_3} - \frac{\partial x_2}{\partial \zeta_3} \frac{\partial x_3}{\partial \zeta_2} & \frac{\partial x_1}{\partial \zeta_3} \frac{\partial x_3}{\partial \zeta_2} - \frac{\partial x_1}{\partial \zeta_2} \frac{\partial x_3}{\partial \zeta_3} & \frac{\partial x_1}{\partial \zeta_2} \frac{\partial x_3}{\partial \zeta_3} - \frac{\partial x_1}{\partial \zeta_3} \frac{\partial x_3}{\partial \zeta_2} \\ \frac{\partial x_2}{\partial \zeta_3} \frac{\partial x_3}{\partial \zeta_1} - \frac{\partial x_2}{\partial \zeta_1} \frac{\partial x_3}{\partial \zeta_3} & \frac{\partial x_1}{\partial \zeta_1} \frac{\partial x_3}{\partial \zeta_3} - \frac{\partial x_1}{\partial \zeta_3} \frac{\partial x_3}{\partial \zeta_1} & \frac{\partial x_1}{\partial \zeta_3} \frac{\partial x_3}{\partial \zeta_1} - \frac{\partial x_1}{\partial \zeta_1} \frac{\partial x_3}{\partial \zeta_3} \\ \frac{\partial x_2}{\partial \zeta_1} \frac{\partial x_3}{\partial \zeta_2} - \frac{\partial x_2}{\partial \zeta_2} \frac{\partial x_3}{\partial \zeta_1} & \frac{\partial x_1}{\partial \zeta_2} \frac{\partial x_3}{\partial \zeta_1} - \frac{\partial x_1}{\partial \zeta_1} \frac{\partial x_3}{\partial \zeta_2} & \frac{\partial x_1}{\partial \zeta_1} \frac{\partial x_3}{\partial \zeta_2} - \frac{\partial x_1}{\partial \zeta_2} \frac{\partial x_3}{\partial \zeta_1} \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

Einsetzen (5.4) in die Gleichung (5.2) ergibt

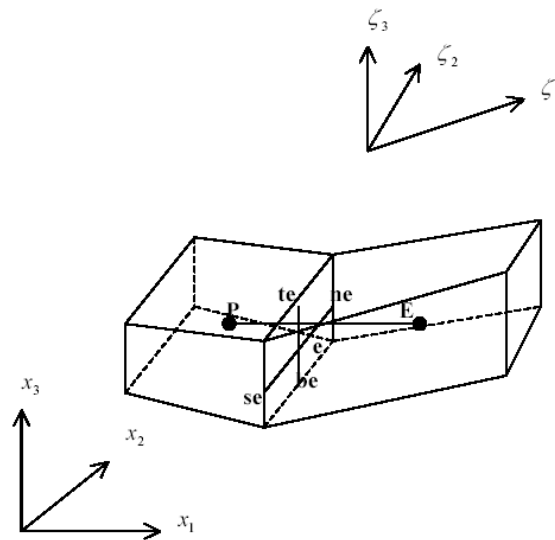
$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho \varphi) dV + \int_\sigma \left( \rho u_i \varphi - \frac{\Gamma_\varphi}{J} \frac{\partial \varphi}{\partial \zeta_k} \beta^{ik} \right) n_i d\sigma = \int_V S_\varphi dV. \quad (5.6)$$

Jetzt sollen die Oberflächen- und Volumenintegrale in der Gleichung (5.6) approximiert werden. Die Abbildung 5.3 stellt Topologie und Nachbarbeziehungen an einer Zelle dar. Hier wird ein Kontrollvolumen **P** betrachtet. Die Mittelpunkte der direkten Nachbarkontrollvolumen werden mit **W** (West), **E** (East), **S** (South), **N**

(North), **B** (Bottom), **T** (Top) bezeichnet. **e**, **w**, **n**, **s**, **t**, **b** bezeichnen entsprechende Seiten des Kontrollvolumens.



**Abbildung 5.3:** Nachbarbeziehungen an einer Zelle



**Abbildung 5.4** Darstellung einer Kontrollvolumenseite.

### Approximation des Oberflächenintegrals

Das Oberflächenintegral für die diffusiven Flüsse wird beispielweise für die Ostseite „**e**“ (Abb 5.4) ausgedrückt. Wir beginnen mit der Berechnung der Projektionen der Vektoren  $PE$ ,  $ne$ ;  $se$ ,  $te$ ;  $be$  (Abb. 5.4) auf die Achse der Kartesischen Koordinaten:

$$\begin{aligned} (\Delta_1 x_i)_e &= x_{i,E} - x_{i,P}, \quad i=1,2,3, \\ (\Delta_2 x_i)_e &= x_{i,ne} - x_{i,se}, \quad i=1,2,3, \\ (\Delta_3 x_i)_e &= x_{i,te} - x_{i,be}, \quad i=1,2,3, \end{aligned} \quad (5.7)$$

wobei die Größe  $(\Delta_j x_i)$  die inkrementelle Änderung der kartesischen Koordinate  $x_i$  entlang der Koordinate  $\zeta_j$  an der Ostseite des Kontrollvolumens beschreibt. Mit diesen geometrischen Informationen lassen sich die Elemente der Transformationsmatrix (5.3) einfach darstellen:

$$\beta^{11} \cong \frac{1}{\Delta\zeta_2 \Delta\zeta_3} \cdot (\Delta_2 x_2 \Delta_3 x_3 - \Delta_3 x_2 \Delta_2 x_3), \quad (5.8)$$

Wobei hier der Notation Pericz gefolgt wird. Leister [66] hat die Indexschreibweise auch für die diskreten Ausdrücke eingeführt, so dass die diskrete Form der Elemente der Transformationsmatrix geschrieben werden kann als:

$$\beta^{ij} \cong \frac{1}{\Delta\zeta_k \Delta\zeta_l} \cdot b_i^j, \quad (5.9)$$

wobei das Indextripel  $(k, l, j)$  mathematisch korrekt ausgedrückt eine Permutation über die Menge  $(1, 2, 3)$  darstellt. Durch Einsetzen von (5.9) in (5.4) wird für die Ableitung (5.4) folgende Approximation erhalten:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x_i} = \frac{\partial \varphi}{\partial \zeta_j} \frac{\beta^{ij}}{J} \cong \frac{1}{J} \frac{1}{\Delta\zeta_j \Delta\zeta_k \Delta\zeta_l} b_i^j \Delta_j \varphi = \frac{1}{J} \frac{1}{\delta V} b_i^j \Delta_j \varphi.$$

Für das Oberflächenintegral ergibt sich

$$\begin{aligned} \int_{\sigma_e} \left( \frac{\Gamma_\varphi}{J} \frac{\partial \varphi}{\partial \zeta_j} \beta^{ij} \right) \vec{n}_i d\sigma &\approx \frac{1}{J} \frac{\Gamma_\varphi}{\delta V} b_i^j b_i^1 \Delta_j \varphi \\ &= \frac{1}{J} \frac{\Gamma_\varphi}{\delta V} \underbrace{\left[ (b_1^1)^2 + (b_2^1)^2 + (b_3^1)^2 \right]}_{\text{implizit}} \Delta_1 \varphi \\ &\quad + \underbrace{(b_1^2 b_1^1 + b_2^2 b_2^1 + b_3^2 b_3^1)}_{\text{explizit}} \Delta_2 \varphi \\ &\quad + \underbrace{(b_1^3 b_1^1 + b_2^3 b_2^1 + b_3^3 b_3^1)}_{\text{explizit}} \Delta_3 \varphi \}, \end{aligned} \quad (5.10)$$

wobei

$$\begin{aligned} \Delta_1 \varphi &= \varphi_E - \varphi_P \\ \Delta_2 \varphi &= \varphi_{ne} - \varphi_{se} \\ \Delta_3 \varphi &= \varphi_{te} - \varphi_{be}. \end{aligned} \quad (5.11)$$

In der Gleichung (5.10) werden auch die Werte der Nachbarzellen ( $NE$ ,  $SE$ ,  $TE$ ,  $BE$ ) berücksichtigt. Durch die implizite Diskretisierung würde die Bandbreite der Matrix zunehmen. Das ist unerwünscht, deswegen gehen nur direkte Nachbarzellen in die Koeffizientenmatrix ein und werden implizit gelöst, die ungünstigen Nachbarzellen werden in den Quellterm gebracht und dort explizit aus vorherigen Zeitschritten oder Iterationen bestimmt. Das Oberflächenintegral für die konvektiven Flüsse an der Ostseite lautet

$$\int_{\sigma_e} \rho u_i \phi n_i d\sigma \approx \phi_e \rho_e u_{ie} b_i^1 = \phi_e \rho_e (u_{1e} b_1^1 + u_{2e} b_2^1 + u_{3e} b_3^1) = \phi_e \dot{m}_e, \quad (5.12)$$

wobei  $\dot{m}_e$  der Massenfluss durch die Ostseite "e" ist.

Wird der Massenfluss eingeführt, kann man nun die Kontinuitätsgleichung in diskreter Form darstellen

$$\dot{m}_e + \dot{m}_n + \dot{m}_t - \dot{m}_w - \dot{m}_s - \dot{m}_b = 0. \quad (5.13)$$

FASTEST verwendet nicht versetzte Gitter und speichert Geschwindigkeits- und Druckwerte in der Mitte der entsprechenden Zelle. Zur Auswertung der Massenflüsse auf der Kontrollvolumenoberfläche müssen die Geschwindigkeiten auf der Oberfläche interpoliert werden.

In FASTEST stehen Verfahren erster (UPWIND oder UDS) und zweiter (Zentraldifferenzen oder CDS) Ordnung zur Verfügung. Die beiden Verfahren können über einen *Blending* –Faktor ( $\gamma$ ) kombiniert werden.

$$\phi_e = \underbrace{\phi_e^{UDS}}_{\text{implizit}} + \gamma \underbrace{(\phi_e^{CDS} - \phi_e^{UDS})}_{\text{explizit}} \quad (5.14)$$

Der UDS-Teil ist implizit behandelt und die Differenz zwischen CDS und UDS in Kombination mit dem iterativen Löser ist explizit behandelt und wird dem Quellterm zugeschlagen.

Für  $\gamma = 0$  bekommt man ein reines UDS-Verfahren und  $\phi_e$  wird in Abhängigkeit von der Richtung des Massenflusses wie folgt bestimmt

$$\phi_e^{UDS} = \begin{cases} \phi_P, & \text{falls } \dot{m}_e > 0 \\ \phi_E, & \text{falls } \dot{m}_e < 0 \end{cases}. \quad (5.15)$$

Dieses Verfahrens produziert keine numerische Oszillation, kann aber ungenau sein, weil es als Verfahren erster Ordnung die numerische Diffusion verursacht. Eine Taylor-Reihenentwicklung von  $\phi$  um den Punkt  $P$  für  $\dot{m}_e > 0$  ergibt

$$\phi_e = \phi_P + (\zeta_e - \zeta_P) \left( \frac{\partial \phi}{\partial \zeta} \right)_P + \frac{(\zeta_e - \zeta_P)^2}{2} \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial \zeta^2} \right)_P + H, \quad (5.16)$$

wobei  $H$  für die Terme höherer Ordnung steht.

Der Fehler oder die Differenz zwischen Approximation und exakter Lösung ist proportional zu  $\Delta\Theta \sim (\zeta_e - \zeta_P) \left( \frac{\partial \phi}{\partial \zeta} \right)_P$ . Dieser Term wird als numerische Diffusion

bezeichnet, weil er als diffusiver Fluss mit der numerischen Diffusivität  $\Gamma_e^n \sim \Delta\zeta$  interpretiert werden kann. Es ist offensichtlich, dass für eine höhere Genauigkeit die Verwendung eines feineren Gitters notwendig ist.

Bei  $\gamma = 1$  verschwindet der UPWIND Anteil in (5.14), dann liegt ein reines CDS-Verfahren vor. Dabei wird  $\varphi_e$  durch lineare Interpolation zwischen den Werten der benachbarten Knoten ( $P$  und  $E$ ) berechnet

$$\varphi_e^{CDS} = \varphi_E \lambda_e + \varphi_P (1 - \lambda_e). \quad (5.17)$$

Der Interpolationsfaktor  $\lambda_e$  ist definiert durch

$$\lambda_e = \frac{\zeta_e - \zeta_P}{\zeta_E - \zeta_P}. \quad (5.18)$$

Die Approximation (5.17) besitzt im Fall eines orthogonalen Gitters einen Interpolationsfehler zweiter Ordnung. Neben der hohen Genauigkeit des Verfahrens können aber in der Lösung numerische Oszillationen auftreten.

Die Verwendung eines *Blending*-Faktors  $\gamma$  zwischen Null und Eins ermöglicht es die genauere Approximation des CDS-Verfahrens mit der numerischen Stabilität des UDS-Verfahrens zu kombinieren und eine optimale Lösung zu finden.

### Approximation des Volumenintegrals

Das Volumenintegral wird normalerweise mittels numerischer Integration approximiert. Der Wert in der Mitte des Kontrollvolumens stellt einen Mittelwert in dem KV dar und wird mit dem Volumen  $\delta V_P$  multipliziert

$$\int_{V_P} \varphi dV \approx \varphi_P \delta V_P. \quad (5.19)$$

Wenn ein Volumenintegral einen Gradient enthält (z.B. der Druckgradient in der Impulsgleichung), werden im nicht-orthogonalen Fall die Transformationskoeffizienten verwendet. Eine Approximation des Gradienten einer Variable  $\varphi$  lautet

$$\begin{aligned} \int_{V_P} \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} dV &\approx \left( \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right)_P \delta V_P = \frac{1}{J} \beta^{ij} \frac{\partial \varphi}{\partial \zeta_j} \delta V_P \\ &\equiv \frac{1}{J} \frac{1}{\Delta \zeta_j \Delta \zeta_k \Delta \zeta_l} b_i^j \Delta_j \varphi \delta V_P = \frac{1}{J} b_i^j \Delta_j \varphi. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Beispielweise für das Volumenintegral über den Druckgradient gilt

$$-\int_{V_P} \frac{\partial p}{\partial x_i} dV \approx -\frac{1}{J} \left[ b_i^1 (p_e - p_w) + b_i^2 (p_n - p_s) + b_i^3 (p_t - p_b) \right], \quad (5.21)$$

wobei  $p_e, p_w, p_n, p_s, p_t, p_b$  die Druckwerte auf den Seitenflächen der KV sind.



### Diskretisierung des instationären Term

Bei instationären Vorgängen muss auch der Zeitterm berücksichtigt werden

$$\int_{V_P} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \varphi) dV \approx \frac{\partial}{\partial t} (\rho \varphi)_P \delta V_P. \quad (5.22)$$

Wenn die Zeitableitung durch eine Rückwärtsdifferenz erster Ordnung approximiert wird, ergibt sich das implizite Euler Verfahren:

$$\frac{(\rho \varphi_P \delta V_P)^{n+1} - (\rho \varphi_P \delta V_P)^n}{\Delta t} = \sum_{Nb} A_{Nb}^{n+1} \varphi_{Nb}^{n+1} + S_P^{n+1} - A_P^{n+1} \varphi_P^{n+1}. \quad (5.23)$$

In der Gleichung (5.23) bezeichnet  $\Delta t$  den Zeitschritt und  $n+1$  und  $n$  stehen für den aktuellen und den davorliegenden Zeitpunkt. Der erste Term auf der linken Seite der Gleichung (5.23) wird implizit betrachtet und zu  $A_P$  addiert. Der zweite Term wird zu  $S_P$  addiert.

Das zweite implizite Einschritt Verfahren ist das *Cranck-Nicolson-Verfahren*, das eine Genauigkeit zweiter Ordnung besitzt und eine Kombination aus dem expliziten und impliziten Verfahren ist:

$$\begin{aligned} \frac{(\rho \varphi_P \delta V_P)^{n+1} - (\rho \varphi_P \delta V_P)^n}{\Delta t} &= 0.5 \left( \sum_{Nb} A_{Nb}^{n+1} \varphi_{Nb}^{n+1} + S_P^{n+1} - A_P^{n+1} \varphi_P^{n+1} \right) \\ &+ 0.5 \left( \sum_{Nb} A_{Nb}^n \varphi_{Nb}^n + S_P^n - A_P^n \varphi_P^n \right). \end{aligned} \quad (5.24)$$

### 5.1.3 Lösungsverfahren

Die räumlich und zeitlich diskretisierte Gleichung wird nun in einer algebraischen Form dargestellt:

$$A_P \varphi_P - \sum_{Nb} A_{Nb} \varphi_{Nb} = S_P \quad (5.25)$$

In Matrixschreibweise gilt für (5.25)

$$A \bar{\varphi} = \bar{S}, \quad (5.26)$$

wobei  $A$  eine quadratische Matrix ist, die aus den Koeffizienten der Gleichung (5.25) konstruiert ist,  $\bar{\varphi}$  ist die Lösung und  $\bar{S}$  ist der Vektor, der die Terme von der rechten Seite (5.25) enthält. Es gibt zwei Möglichkeiten zur Lösung des Gleichungssystems: direkte Methoden (z.b. *Gauß Elimination* oder LU-Zerlegung) und iterative Methoden. Durch Verwendung direkter Methoden wird die Matrix  $A$  als Zerlegung in das Produkt einer unteren Dreiecksmatrix und einer oberen Dreiecksmatrix interpretiert. Die

Dreieckmatrizen der dünnbesetzten Matrix  $A$  sind nicht dünnbesetzt, so dass der Aufwand dieser Methoden bei der Anwendung für zwei- und dreidimensionale Probleme relativ hoch ist und die Verwendung iterativer Methoden effizienter ist. Diese Methoden gehen von einer geschätzten Lösung des Gleichungssystems aus die durch mehrere Iterationen verbessert wird. Nach  $n$  Iterationen bekommt man eine ungefähre Lösung  $\bar{\varphi}^n$ . Die Gleichung (5.26) bekommt ein Residuumsvektor  $\bar{r}^n$

$$A\bar{\varphi}^n = \bar{S} - \bar{r}^n \quad (5.27)$$

Das Ziel der iterativen Verfahren ist es, den Residuumsvektor  $\bar{r}^n$  zu Null bringen. Das kann folgendermaßen erfüllt werden. Wir betrachten

$$M\bar{\varphi}^{n+1} = N\bar{\varphi}^n + B. \quad (5.28)$$

Wird  $M\bar{\varphi}^n$  von jeder Seite abgezogen, bekommt man

$$M(\bar{\varphi}^{n+1} - \bar{\varphi}^n) = B - (M - N)\bar{\varphi}^n \quad (5.29)$$

oder

$$M\bar{\delta}^n = \bar{r}^n. \quad (5.30)$$

Hier ist  $\bar{\delta}^n = \bar{\varphi}^{n+1} - \bar{\varphi}^n$  eine Konvergenzrate. Effiziente Lösung mittels eines iterativen Verfahrens benötigt eine schnelle und einfache Lösung von  $N\bar{\varphi}^n$  und (5.28). Um die schnelle Konvergenz zu erreichen muss die Matrix  $M$  eine möglichst gute Näherung für die Matrix  $A$  darstellen. Das kann mit Hilfe sogenannte SIP (strongly implicit procedure) Verfahren von Stone [123], Leister und Peric [66] erzielt werden. Diese Verfahren wurden in FASTEST verwendet.

Das SIP-Verfahren führt eine unvollständige  $LU$ -Zerlegung durch. Dabei wird die Matrix  $A$  durch eine Aufspaltung in zwei Dreieckmatrizen und eine Fehlermatrix ersetzt.

$$M = LU = A + N \quad (5.31)$$

$L$  bildet eine untere und  $U$  eine obere Dreieckmatrix, wo jedes Element, das dem Nullelement der Matrix  $A$  entspricht auf Null gesetzt ist. Obwohl  $L$  und  $U$  die Nichtnullkoeffizienten auf den selben Diagonalen haben wie die Matrix  $A$ , besitzt die Produktionsmatrix  $LU$  zusätzliche Nichtnulldiagonalen. Die zusätzlichen Koeffizienten entsprechen den Punkten  $NW$ ,  $SE$ , etc. im numerischen Gitter. Da die Matrix  $A$  keine Koeffizienten für die Punkte  $NW$ ,  $SE$ , etc. hat, muss die Matrix  $N$  diese Diagonalen erhalten. Stone hat vorgeschlagen die Beiträge der zusätzlichen Diagonalen mittels der Nachbarwerte zu approximieren. Der Vektor  $N\bar{\varphi} \approx 0$  soll möglichst klein sein, so dass  $M$  die beste Approximation für  $A$  ist.

Das Verfahren kann folgendermaßen eingeordnet werden. Aus den Koeffizienten der Matrix  $A$  können die  $N$  Elemente berechnet werden. Die Summe der Elemente  $A$  und  $N$  ist gleich  $M$ . Alle Elemente von  $L$  und  $U$  können jetzt definiert werden und das Gleichungssystem gelöst werden. Das System (5.30) wird in folgender Form dargestellt:

$$LU\bar{\delta}^n = \bar{r}^n \quad (5.32)$$

Das Gleichungssystem wird auf Basis einer  $LU$ -Zerlegung gelöst. Wird (5.32) mit  $L^{-1}$  multipliziert, bekommt man

$$U\bar{\delta}^n = L^{-1}\bar{r}^n = \bar{R}^n \quad (5.33)$$

Zuerst wird  $\bar{R}^n$  mittels Marching Methode durch Vorwärtseinsetzen berechnet, danach berechnet man  $\bar{\delta}^n$  durch Rückwärtseinsetzen. Die gesuchte Lösung ist  $\bar{\varphi}^{n+1} = \bar{\varphi}^n + \bar{\delta}^n$ . Der Iterationsprozesses wird angewendet bis  $\bar{r}^n$  kleiner als eine angegebene Grenze ist.

### Druckkorrekturverfahren

Die Sicherstellung der Massenkonservierung wird mittels Druckkorrekturverfahren gewährleistet. Damit wird der Druck und das Geschwindigkeitsfeld aneinander angepasst. In FASTEST wurde ein modifiziertes SIMPLE-Verfahren (Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations) von Rhie und Chou [91] implementiert, das Druckoszillationen bei nicht versetzten Gittern vermeidet.

Ein Iterationsprozess wird wie folgt durchgeführt. Für jede neue Iteration  $m$  werden die Matrixkoeffizienten und Quellterme aus Massenfluss- und Druckwerten des vorherigen Iterationsschrittes  $m-1$  berechnet. Das Gleichungssystem (5.25) für jede Geschwindigkeitskomponente  $u_i$  wird wie folgend dargestellt:

$$A_P^{u^{m-1}} u_{i,P}^m - \sum_{Nb} A_{Nb}^{u^{m-1}} u_{i,Nb}^m = Q_P^{m-1} - (\delta_i p^{m-1})_P, \quad (5.34)$$

wobei  $S_P = Q_P^{m-1} - (\delta_i p^{m-1})_P$  und  $\delta_i p^{m-1}$  bezeichnet den Druckgradient. In einem ersten Schritt wird für ein geschätztes Druckfeld  $p^* = p^{m-1}$  das Geschwindigkeitsfeld  $u_i^*$  berechnet. Aus (5.34) folgt:

$$u_{i,P}^* = \frac{1}{A_P^{u^{m-1}}} \left[ \sum_{Nb} A_{Nb}^{u^{m-1}} u_{i,Nb}^* + Q_P^{m-1} - (\delta_i p^*)_P \right]. \quad (5.35)$$

Die Geschwindigkeitskomponenten  $u_i^*$  erfüllen nicht die Kontinuitätsgleichung. Wenn man diese Geschwindigkeiten in die Kontinuitätsgleichung einsetzt, ergibt sich eine unphysikalische Massenquelle:

$$\Delta m_P^* = F_e^* - F_w^* + F_n^* - F_s^* + F_t^* - F_b^*, \quad (5.36)$$

wobei die Flüsse durch ein Kontrollvolumen definiert sind als

$$F_e^* = \rho_e u_{i,e}^* b_{i,e}^1. \quad (5.37)$$

Als nächstes wird ein Geschwindigkeits-  $u_i^{**}$  und Druckfeld  $p^{**}$  bestimmt, die beide Impuls- und Kontinuitätsgleichung, erfüllen.

$$u_i^{**} = u_i^* + u_i^{cor}, \quad p^{**} = p^* + p^{cor} \quad (5.38)$$

und

$$u_{i,P}^{**} = \frac{1}{A_P^{u_{m-1}}} \left[ \sum_{Nb} A_{Nb}^{u_{m-1}} u_{i,Nb}^* + Q_P^{m-1} - (\delta_i p^{**})_P \right]. \quad (5.39)$$

In der Gleichung (5.39) werden die Geschwindigkeitskomponenten  $u_i^*$  in den Nachbarnpunkten verwendet, so das Konvergenzkriterium  $u_i^{cor} \rightarrow 0$  ist. Durch Subtraktion der Gl.(5.35) von Gl.(5.39) bekommt man die Beziehung zwischen  $u_i^{cor}$  und  $p^{cor}$ :

$$u_{i,P}^{cor} = (\delta_i p^{cor})_P \quad (5.40)$$

Die Korrektur für die Massenflüsse

$$F_e^{cor} = \rho_e u_{i,e}^{cor} b_{i,e}^1. \quad (5.41)$$

wird in die Gleichung (5.36) eingesetzt:

$$\Delta m_P^* = F_e^{cor} - F_w^{cor} + F_n^{cor} - F_s^{cor} + F_t^{cor} - F_b^{cor*} \quad (5.42)$$

und die Massenquelle verschwindet. Durch Einsetzen (5.40) in (5.41) und dann in (5.42) ergibt sich die lineare Druckkorrekturgleichung:

$$A_P p_P^{cor} - \sum_{Nb} A_{Nb} p_{Nb}^{cor} = \Delta m_P^*. \quad (5.43)$$

Der Ablauf des Druckkorrekturverfahrens kann in FASTEST durch zwei Schritte gekennzeichnet werden:

Im **Prädiktorschritt** werden ausgehend von der Anfangsbelegung die Gleichungen (5.35) und (5.36) gelöst. Im **Korrektorschritt** wird die Massenquelle  $\Delta m^*$  in die Gleichung (5.43) eingesetzt, wodurch man Werte von  $p^{cor}$  bekommt. Das Druckkorrekturfeld wird zum Druckfeld  $p^*$  addiert:

$$p^{**} = p^* + \alpha_p p^{cor}, \quad 0 < \alpha_p \leq 1. \quad (5.44)$$

Hier ist  $\alpha_p$  ein Relaxationsfaktor, der verwendet wird, um die Instabilitäten zu vermeiden. Danach werden die Geschwindigkeitskorrektur Komponenten  $u_i^{cor}$  nach (5.40) und anschließend  $u_i^{**}$ ,  $F_{i,e}^{**}$  für die nächste äußere Iteration berechnet.

### 5.2 Numerische Behandlung der G-Gleichung

Die Besonderheit der  $G$ -Gleichung ist, dass sie nur auf der Flammenfront (Phasengrenzfläche, die den Übergang physikalischer Eigenschaften bezeichnet)  $\tilde{G} = G_0$  definiert ist und bedingt die Anwendung spezieller Lösungsmethoden. Die Methode zur numerischen Beschreibung des Transports von Phasengrenzflächen können generell in *capturing*- und *tracking*-Verfahren eingeteilt werden.

Bei den *capturing*-Verfahren wird die Diskontinuität einer Zustandsgröße, z.B. der Dichte, mittels einer hochgenauen Verfahren aufgelöst. Boris [7] gibt eine Übersicht über die *capturing*-Verfahren. Die *capturing*-Verfahren sind einfach zu implementieren, leider wird die Diskontinuität über einige Gitterpunkten verschmiert wiedergegeben. Für die Berechnung der Flammenfront kann diese Methode nicht verwendet werden, da die Kenntnis des unverbrannten oder verbrannten Zustands unmittelbar an der Flammefront vorausgesetzt ist.

Die *tracking*-Verfahren hingegen erlauben die scharfe Darstellung der Diskontinuitäten und sind dadurch prinzipiell besser geeignet zur Beschreibung der Ausbreitung der Flammenfront. Sie können weiterhin unterteilt werden in *Front-tracking*-Verfahren, *Volume-tracking*-Verfahren und *Level-Set*-Verfahren. Die *Front-tracking*-Verfahren [100,129] beschreiben die Phasengrenzfläche durch eine Höhenfunktion oder einen Polygonzug. Das Verfahren bietet eine hohe Genauigkeit bei moderatem numerischem Aufwand. Der Schwachpunkt des Verfahrens ist, dass Topologieänderung oder starke Deformationen schwierig zu handhaben sind, da hier das Gitter völlig umstrukturiert werden muss. Bei *Volume-of-Fluid* Verfahren [38,58,82] wird eine Volumenanteilsfunktion eingeführt, die in jeder Gitterzelle den prozentualen Volumenanteil des Fluids zum Gesamtzellvolumen angibt. Die exakte Lage der Grenzfläche muss bei der *Volume-of-Fluid*-Methode gesondert bestimmt werden. Üblicherweise wird dazu die Grenzfläche mit Hilfe von SLIC- oder PLIC-Methode linear approximiert. Als Nachteil des Verfahrens sind Unstetigkeiten bei der Krümmungsberechnung zu nennen. Das *Level-Set*-Verfahren definiert die Grenzfläche als Null-Level einer Abstandsfunktion. Die Fortbewegung der Oberfläche reduziert sich auf den Transport dieser Abstandsfunktion. Im Gegensatz zum Volumenanteil bei der *Volume-of-Fluid*-Methode ist der Null-Level der Abstandsfunktion immer stetig. Die Berechnung der Krümmung geht auf natürliche Weise aus der *Level-Set*-Funktion [113]. Aus diesen Gründen wird in der vorliegenden Arbeit die *Level-set*-Methode eingesetzt.

#### 5.2.1 Level-Set-Methode

Die *Level-Set*-Methode wurde im Jahr 1988 von Osher und Sethian [85] eingeführt und wird seitdem erfolgreich für verschiedene technische Probleme angewandt.

Im Rahmen der *Level-set*-Methode wird die zeitliche Änderung der Funktion  $\phi(x_j, t)$ , die mit der Ausbreitungsgeschwindigkeit  $W$  transportiert wird, beschrieben:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + W|\nabla \phi| = 0. \quad (5.45)$$

Die Ausbreitungsgeschwindigkeit kann neben dem konvektiven Transport durch das Strömungsfeld zusätzliche, auf die Phasengrenzfläche einwirkende, Anteile wie z.B. Krümmung  $W_{curv}$  oder Fortpflanzungsgeschwindigkeit  $W_{prop}$  beinhalten:  $W = W_{prop} + W_{curv} + W_{conv}$ , Mit  $W_{prop} = W_0$ ,  $W_{curv} = \alpha\kappa$ ,  $W_{conv} = \vec{U}(x, y, z, t) \cdot \vec{n}$ , nimmt die Gleichung (5.45) folgende Form an:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + U \frac{\partial \phi}{\partial x_i} = W_0|\nabla \phi| - \alpha\kappa|\nabla \phi|,$$

die der Gleichung (3.62) identisch ist.

Das als Abstandsfunktion initialisierte G-Feld erfüllt auf Grund der Einwirkung von Krümmung und Ausbreitungseffekten nicht mehr die Abstandsbedingungen, was zu Problemen bei der Berechnung lokaler Größen führen kann. Um das Problem zu lösen, wird im Rahmen der *Level-set*-Methode die Wiederherstellung der Abstandsfunktion durch die sogenannte Reinitialisierung gewährleistet.

### 5.2.2 Reinitialisierung

Die Erhaltung der Abstandsfunktion

$$|\nabla \tilde{G}| = 1 \quad (5.46)$$

ist notwendig aufgrund verschiedener Aspekte:

Zum einen muss die durch den Transport des G-Feldes mit der lokalen Strömungsgeschwindigkeit verursachte Aufteilung der Gradienten um die Grenzfläche vermieden werden, da dies zu Unstimmigkeiten bei der Berechnung geometrieabhängiger Größen wie Krümmung, die Richtungsänderung pro Längeneinheit definiert, führen kann. Zum anderen besteht ein direkter Zusammenhang zwischen der turbulenten Flammendicke und dem G-Feld, da die Zellen des diskretisierten Berechnungsgebietes nur bei Erfüllung der Abstandsfunktion der turbulenten Flammendicke zugeordnet werden können.

Einen Überblick über unterschiedliche Reinitialisierungsverfahren geben Keck [48], Osher&Fedkiw [85] sowie Sethian [115]. Die geometrische Reinitialisierung wurde für zweidimensionale Fälle beispielweise von Repp [104] beschrieben und angewandt. Hierbei ist zur expliziten Berechnung des minimalen Abstands eines Punktes von der Grenzfläche zunächst die Rekonstruktion der  $G_0$ -Isolinie aus den in den Zellenmitten gespeicherten Daten des G-Feldes notwendig. Anschließend muss für jede Zelle abseits der Flamme der geometrische Abstand zu den rekonstruierten Flammenstückchen bestimmt werden. Im Gegensatz zu zweidimensionalen Zellen, sind in dreidimensionalen Zellen sehr komplexe Flammenfronten denkbar. Großer Rechenzeitbedarf und die geometrische Komplexität des Verfahrens macht diese

Methode wenig attraktiv für die dreidimensionale komplexe Geometrie, die eine Gasturbinenbrennkammer darstellt.

Ein alternatives Verfahren stellt die Reinitialisierungsmethode nach Sussman, Smereka & Osher [128] dar, wo, ausgehend von dem Level  $G_0 = 0$ , das  $G$ -Feld so angepasst wird, dass die Bedingung (5.46) erfüllt ist. Das wird anhand folgender Differentialgleichung sichergestellt:

$$\frac{\tilde{G}^{n+1} - \tilde{G}^n}{\Delta \tau} = \text{sig}_\Delta (\tilde{G}^0 - G_0) (1 - |\Delta \tilde{G}^n|), \quad (5.47)$$

wobei  $n$  ein Iterationsindex ist und  $\Delta \tau$  den Iterationsschritt darstellt. Um die Stabilitätsbedingungen einzuhalten, empfehlen Sussman *et al.* [124] für äquidistante Gitter  $\Delta \tau = 0.1 \Delta x$ . In der vorliegenden Arbeit wurde dies in Form von

$$\Delta \tau = 0.1 \min(\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta x_3), \quad (5.48)$$

umgesetzt, wobei  $\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta x_3$  die örtliche Gitterweite ist.

Der Operator  $\text{sig}_\Delta$  ist eine geglättete Signum-Funktion

$$\text{sig}_\Delta = \frac{\tilde{G}^0 - G_0}{\sqrt{(\tilde{G}^0 - G_0)^2 + \Delta^2}} \quad (5.49)$$

mit  $\Delta$  gleich der Gitterweite.

Zur Bestimmung des  $|\nabla \tilde{G}^n|$  werden zuerst die in die einzelnen Koordinatenrichtungen laufenden lokalen Gradienten mittels Vorwärts- bzw. Rückwärtsdifferenzen berechnet. Am Beispiel  $x_1$ -Koordinaten gilt dann:

$$\frac{\partial G^{i,j,k}}{\partial x_1^-} = \frac{G^{i,j,k} - G^{i-1,j,k}}{\Delta x_1^-} \quad (5.50)$$

Anschließend müssen diejenigen Gradienten ausgewählt werden, die in die Richtung der Flamme zeigen:

$$\begin{aligned}
 |\nabla \tilde{G}^n| = & \left\{ \begin{array}{ll} \sqrt{\begin{array}{l} \max(\max(\partial \tilde{G} / \partial x^{-}_1; 0)^2; \min(\partial \tilde{G} / \partial x^{+}_1; 0)^2) + \dots \\ \max(\max(\partial \tilde{G} / \partial x^{-}_2; 0)^2; \min(\partial \tilde{G} / \partial x^{+}_2; 0)^2) + \dots \\ \max(\max(\partial \tilde{G} / \partial x^{-}_3; 0)^2; \min(\partial \tilde{G} / \partial x^{+}_3; 0)^2) \end{array}} & \text{für } \text{sig}_{\Delta}(\tilde{G}^0 - G_0) < 0 \\ \\ \sqrt{\begin{array}{l} \max(\min(\partial \tilde{G} / \partial x^{-}_1; 0)^2; \max(\partial \tilde{G} / \partial x^{+}_1; 0)^2) + \dots \\ \max(\min(\partial \tilde{G} / \partial x^{-}_2; 0)^2; \max(\partial \tilde{G} / \partial x^{+}_2; 0)^2) + \dots \\ \max(\min(\partial \tilde{G} / \partial x^{-}_3; 0)^2; \max(\partial \tilde{G} / \partial x^{+}_3; 0)^2) \end{array}} & \text{für } \text{sig}_{\Delta}(\tilde{G}^0 - G_0) > 0 \\ \\ 1 & \text{für } \text{sig}_{\Delta}(\tilde{G}^0 - G_0) = 0 \end{array} \right. \quad (5.51)
 \end{aligned}$$

Die Reinitialisierung wird durchgeführt bis zum Erreichen eines der folgenden drei Abbruchkriterien:

- Der maximale Iterationsschritt wird erreicht:  $n=n_{max}$
- Die maximale Abweichung von der Abstandfunktion ist:

$$\max \left| |\nabla \tilde{G}^n| - 1 \right| < 10^{-3} \quad (5.52)$$

- Die Änderungen sind gering:

$$\max \left( \left| \frac{\max |\nabla \tilde{G}^n| - 1}{\max |\nabla \tilde{G}^{n-1}| - 1} - 1 \right|, \left| \frac{\sum |\nabla \tilde{G}^n| - 1}{\sum |\nabla \tilde{G}^{n-1}| - 1} - 1 \right|, \left| \frac{\sum (|\nabla \tilde{G}^n| - 1)^2}{\sum (|\nabla \tilde{G}^{n-1}| - 1)^2} - 1 \right| \right) < 10^{-3} \quad (5.53)$$

Ein wesentlicher Nachteil dieses Verfahrens ist, dass die Flammenfront in Folge numerischer Fehler während der Reinitialisierung verschoben wird.

Um das Problem zu lösen, modifizieren Russo und Smereka [105] das Verfahren von Sussman *et al.* [124] für die  $G$ -Punkte, die nahe der Flamme liegen. Für alle anderen Punkte bleibt das Verfahren nach Sussman *et al.* unverändert. Der Algorithmus nach Russo und Smereka beginnt mit der Berechnung des vorzeichenbehafteten Abstandes  $D^{i,j,k}$  von einem  $G$ -Punkt zum nächsten Flammenpunkt. Dabei wird der Ansatz verwendet, dass das Verhältnis zwischen dem berechneten Gradienten beim Iterationsstart  $|\nabla G^{i,j,k}|^0$  und gewünschtem Gradienten  $|\nabla G^{i,j,k}| = 1$  dem Verhältnis aus aktuellem  $G$ -Wert ( $G^{i,j,k} - G_0$ ) zum geschätzten  $G$ -Wert ( $D^{i,j,k}$ ) entspricht.



$$\frac{|\nabla G^{i,j,k}|^0}{|\nabla G^{i,j,k}|} = \frac{G^{i,j,k} - G_0}{D^{i,j,k}} \Rightarrow D^{i,j,k} = \frac{G^{i,j,k} - G_0}{|\nabla G^{i,j,k}|^0} \quad (5.54)$$

Zur Berechnung von  $|\nabla G^{i,j,k}|^0$  wird folgender Ansatz verwendet (beispielweise für  $x_1$ -Richtung):

$$\frac{|\nabla G^{i,j,k}|}{\partial x_1} = \max\left(\left|\frac{\partial G}{\partial x^\pm}\right|; \left|\frac{\partial G}{\partial x^-}\right|; \left|\frac{\partial G}{\partial x^+}\right|; \varepsilon\right) \text{ mit } \frac{\partial G}{\partial x^\pm} = \frac{G^{i+1,j,k} - G^{i-1,j,k}}{\Delta x_1^+ - \Delta x_1^-}, \quad (5.55)$$

wobei  $\varepsilon = 10^{-5}$  gilt.

Weiter wird die Abstandsfunktion iterativ wie folgt bestimmt:

$$\frac{G^{n+1} - G^n}{\Delta \tau} = sig_D(G^0 - G_0)(1 - |\nabla^{up} G^n|) \quad (5.56)$$

Der Operator  $sig_D(\cdot)$  stellt eine geglättete Signum-Funktion für die Flammennahpunkte dar

$$sig_D = \frac{D^{i,j,k}}{\Delta x} \quad (5.57)$$

und der Gradient  $|\nabla^{up} G^n|$  wird folgendermaßen berechnet:

$$|\nabla^{up} G^n| = \frac{G^n - G_0}{D^0} \quad (5.58)$$

Werden die Gleichungen (5.56), (5.57), (5.58) zusammengefasst, bekommt man folgende Iterationsvorschrift:

$$\frac{G^{n+1} - G^n}{\Delta \tau / \Delta x} = sig_D(G^0 - G_0)(G^n - G_0) - D_0, \quad (5.59)$$

mit  $\Delta \tau / \Delta x = const$ . Russo und Smereka setzen  $\Delta \tau / \Delta x = 0.5$ .

In dieser Arbeit wurde der Algorithmus nach Russo und Smereka [105] zur Reinitialisierung des G-Feldes angewendet. Für nicht-orthogonales Gitter werden die G-Gradienten im FASTEST mittels Vorwärts- bzw. Rückwärtsdifferenzen berechnet. Als Beispiel ergibt sich für die Rückwärtsdifferenzen in  $x_1$ -Richtung:

$$\frac{\partial G^{i,j,k}}{\partial x_1^-} = \frac{G^{i,j,k} - G^{i-1,j,k}}{\sqrt{(x_{1c}^{i,j,k} - x_{1c}^{i-1,j,k})^2 + (x_{1c}^{i,j,k} - x_{1c}^{i,j-1,k})^2 + (x_{1c}^{i,j,k} - x_{1c}^{i,j,k-1})^2}} \quad (5.60)$$

Hierbei ist  $x_{1c}$  die Koordinate des Zellenmittelpunktes.

### 5.2.3 Berechnung der G-Gleichungsvariablen

Im Folgenden wird ein Überblick über die Berechnung der G-Gleichungsvariablen und die Diskretisierung der G-Gleichung gegeben.

In der Formulierung der Transportgleichung für  $\tilde{G}$  fehlt ein Diffusionsterm, was für numerische Simulation bedeutet, dass die Lösung in Abhängigkeit von dem verwendeten Diskretisierungsverfahren instabil sein kann [108]. So wird die Diskretisierung des Konvektionsterms durch Zentralkifferenzen ausgeschlossen. In dieser Arbeit wurden das UDS-Verfahren zur Diskretisierung des konvektiven Terms verwendet.

#### Berechnung der Krümmung

Für die Krümmung ergibt sich im dreidimensionalen Fall in dem kartesischen Koordinatensystem :

$$\tilde{\kappa} = -\nabla \cdot \frac{\nabla \tilde{G}}{|\nabla \tilde{G}|} = \frac{\left\{ \left( \frac{\partial^2 \tilde{G}}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \tilde{G}}{\partial x_3^2} \right) \left( \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_1} \right)^2 + \left( \frac{\partial^2 \tilde{G}}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \tilde{G}}{\partial x_3^2} \right) \left( \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_2} \right)^2 + \left( \frac{\partial^2 \tilde{G}}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \tilde{G}}{\partial x_2^2} \right) \left( \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_3} \right)^2 - 2 \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_1} \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_2} \frac{\partial^2 \tilde{G}}{\partial x_1 \partial x_2} - 2 \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_1} \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_3} \frac{\partial^2 \tilde{G}}{\partial x_1 \partial x_3} - 2 \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_3} \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_2} \frac{\partial^2 \tilde{G}}{\partial x_3 \partial x_2} \right\}}{\left( \left( \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_1} \right)^2 + \left( \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_2} \right)^2 + \left( \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_3} \right)^2 \right)^{3/2}}. \quad (5.61)$$

#### Bestimmung des Absolutwerts des Gradienten

Der Absolutwert des Gradienten wird nach einem Ansatz von Osher und Sethian in der gemittelten G-Gleichung (3.43) folgendermaßen berechnet:

$$|\nabla \tilde{G}| = \left[ \sum_{n=1,2,3} \left( \max \left( \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_n^+}, 0 \right) \right)^2 + \left( \min \left( \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_n^-}, 0 \right) \right)^2 \right]^{1/2} \quad (5.62)$$

Die Gradienten in (5.61) und (5.62) werden analog (5.60) bestimmt.

### 5.3 Randbedingungen der Strömungs- und Skalarfelder

Die korrekte Formulierung der Rand- und Anfangsbedingungen für alle zu lösenden Transportgleichungen ist eine wichtige Aufgabe bei der numerischen Simulation. In den in dieser Arbeit simulierten Konfigurationen treten folgende Randbedingungen auf:

**Eintrittsrand** Bei Eintrittsrändern strömt in der Regel Fluid mit definiertem Geschwindigkeitsprofil in das Rechengebiet ein. Für die Definition der Turbulenz- und Skalargrößen gelten Dirichletrandbedingungen. Der konvektive Fluss durch die Eintrittsfläche wird mit (5.12) berechnet und zu dem Quellterm der Gl.(5.25) addiert. Der Koeffizient in dem nicht existierenden Punkt  $E$  (Abb. 5.4) ist gleich Null. Der diffusive Fluss wird als Differenz zwischen dem Wert auf dem Eintrittsrand und dem in der Zellenmitte berechnet und explizit zu dem Quellterm auf der rechten Seite der Gl.(5.25) addiert.

**Ausströmrandbedingungen** Ziel der Formulierung der Ausströmrandbedingungen ist die Rückwirkungen auf das Strömungsfeld möglichst gering zu halten. Der Ausstromrand soll so weit wie möglich von dem interessierenden Gebiet entfernt liegen. Für alle Variablen gelten Neumannbedingungen, der Gradient der Variablen verschwindet. Die Massenerhaltung wird überprüft, wobei der Massenfluss durch den Einstromrand mit dem Massenfluss durch den Ausstromrand verglichen wird.

**Symmetrierand** Auf dem Symmetrierand unterscheidet man drei Typen von Randbedingungen:

1. Für alle Skalargrößen gelten Neumannbedingungen, der Gradient der Variablen ist gleich Null.
2. Für die Vektorgrößen wie Geschwindigkeiten und Geschwindigkeit-Skalar Korrelationen gilt: die Vektorkomponente in normaler Richtung zum Symmetrierand sind gleich Null. Die Vektorkomponenten, die parallel zu dem Symmetrierand sind, haben Null-Gradient in der zu dem Symmetrierand normalen Richtung.
3. Die Tensorgrößen werden folgendermaßen behandelt:  
Gradient in der zur Symmetrieffläche normalen Richtung ist gleich Null, wenn die normale Tensorkomponente und tangentiale Tensorkomponente, deren Schwankungsgeschwindigkeitskomponente parallel dem Symmetrierand sind. Die tangentiale Tensorkomponente, deren Schwankungsgeschwindigkeitskomponente normal zur Symmetrieffläche sind, werden auf dem Symmetrierand zu Null gesetzt.

**Wandrandbedingungen** Für alle Skalare, die in dieser Arbeit verwendet wurden außer Enthalpie im nicht adiabaten Fall gelten Neumannrandbedingungen. Für die

nicht adiabate Enthalpie auf der Wand gelten Dirichletrandbedingungen. Die Enthalpie wird als Funktion des Mischungsgrades, Strahlungsgrades und der eingegebenen Wandtemperatur betrachtet:  $\tilde{h}_w = f(\tilde{\xi}, \xi''^2, g)$ .

Die Geschwindigkeitskomponenten, die turbulente kinetische Energie, Dissipation und Reynoldsspannungen werden an der Wand besonderes behandelt. Da die Strömung an festen Wänden über sehr kurze Entfernungen eine starke Abbremsung erfährt bildet sich auf den Wänden eine Grenzschicht aus. Bei turbulenten Strömungen weist diese Grenzschicht unterschiedliche Bereiche auf: eine viskose Unterschicht, einen Übergangsbereich und eine turbulente Grenzschicht. Weil in der Grenzschicht die Turbulenzmodelle aufgrund der sinkenden Reynoldszahl ihre Gültigkeit verlieren, muss die Modellierung für diesen Bereich besondere Berechnungsvorschriften bereitstellen. Für die Modellierung der wandnahen Turbulenz existieren verschiedene Modelle. Das sind die Modelle für kleine Reynoldszahlen, die sogenannten *Low-Reynolds-* Modells, die eine feine Auflösung der Grenzschicht verlangen und Modelle, die Wandfunktion, die auf der Annahme des sogenannten logarithmischen Gesetzes basiert, verwenden.

**Die mittleren Geschwindigkeitskomponenten** Mit abnehmendem Abstand sinken die turbulenten Schwankungen zu Null, so dass die Wandschubspannung nur durch den Gradienten des wandparallelen Geschwindigkeitsvektors  $U_P$  entlang der Wandnormalen beschrieben werden kann, wenn der Wandabstand  $l$  ausreichend klein ist:

$$\tau_w = -\mu \lim_{l \rightarrow 0} \frac{\partial U_P}{\partial n} \quad (5.63)$$

Der Druckgradient in wandparalleler Richtung in der Wandnähe ist vernachlässigbar klein. Das gleiche gilt für alle wandparallele Gradienten. Infolgedessen entfällt unter Voraussetzungen der Haftbedingung die gesamte linke Seite der wandnormalen Impulsgleichung (2.39) sowie deren Druckgradient. Die Gleichung (2.39) reduziert sich zu

$$\tau_w = -\mu \frac{\partial U_P}{\partial n} + \widetilde{\bar{\rho} u_p'' u_n''}. \quad (5.64)$$

Folgende Parameter müssen eingeführt werden:

Der dimensionslose Wandabstand

$$y^+ = \frac{nu_\tau \rho}{\mu}, \quad (5.65)$$

wobei

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (5.66)$$

die sogenannte Wandschubspannungsgeschwindigkeit ist.

Die dimensionslose Geschwindigkeit ist definiert als

$$U^+ = \frac{U_P}{u_\tau} \quad (5.67)$$

Mit Hilfe des dimensionslosen Abstandes lassen sich die wandnahen Gebiete in zwei Schichten einteilen:

- Die viskose und thermische Unterschicht  $y^+ \leq 11.63$ : Hier überwiegen die laminaren Transportvorgänge

$$\mu_t \ll \mu, \quad \overline{\rho u_p'' u_n''} \Big|_{wand} \approx 0, \quad \text{aus (5.64)} \quad \tau_w = -\mu \frac{\partial \vec{U}_P}{\partial n}$$

Werden (5.65) und (5.66) in (5.64) eingesetzt und integriert, so ergibt sich:

$$U^+ = y^+ \quad (5.68)$$

- Der vollturbulente Bereich  $11.63 < y^+$  befindet sich außerhalb der Reibungsunterschicht- aber immer noch in Wandnähe: Hier überwiegen die turbulenten Transportvorgänge, d.h.  $\mu_t \gg \mu$

$$\text{und } \tau_w = \overline{\rho u_p'' u_n''}, \quad \mu \frac{\partial \vec{U}_P}{\partial n} = 0$$

Aus (5.64) ergibt sich:

$$U^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(y^+) + B, \quad (5.69)$$

wobei  $\kappa = 0.4$  die von-Karman Konstante und  $B = 5.2$  eine empirische Konstante ist.

**Die turbulente kinetische Energie** In der turbulenten Unterschicht wird lokales Gleichgewicht angenommen, d.h. die Produktionsrate ist gleich der Dissipationsrate:

$$P_k = \overline{\rho \varepsilon}. \quad (5.70)$$

Der Produktionsterm in der  $\tilde{k}$ -Gleichung in der vollentwickelten turbulenten Unterschicht bekanntlich ist

$$P_k = -\overline{\rho u_p'' u_n''} \frac{\partial U_P}{\partial n}. \quad (5.71)$$

In der viskosen Unterschicht die Strömung ist quasi laminar. Dabei liefert die viskose Spannung von  $\tilde{k}$  einen dominierenden Term und kann die turbulente Produktion darstellen.

Die allgemeine Form des Produktionsterms ist

$$P_k = -\tau_w \frac{\partial U_P}{\partial n}. \quad (5.72)$$

Für die Wandschubspannung gelten folgende Definitionen:

- In der viskosen Unterschicht:

$$\tau_w = \bar{\rho} u_\tau^2 = -\mu \frac{\partial U_P}{\partial n}. \quad (5.73)$$

Da in der viskosen Unterschicht  $U^+ = y^+$  und  $u_\tau^2 = \frac{\mu U_P}{\bar{\rho} n}$  ist, gilt für die Wandschubspannung

$$\tau_w = \mu \frac{U_P}{n}, \quad (5.74)$$

und der Produktionsterm in (5.72) kann mit (5.73) und (5.74) folgendermaßen definiert werden:

$$P_k = \mu \left( \frac{U_P}{n} \right)^2. \quad (5.75)$$

- In der turbulenten Unterschicht definiert man die Wandschubspannung wie folgt:

$$\tau_w = \bar{\rho} \widetilde{u_p'' u_n''} = \bar{\rho} u_\tau^2, \quad (5.76)$$

$u_\tau$  kann mit Hilfe des logarithmischen Wandgesetzes berechnet werden

$$U^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(y^+ E), \quad E = e^{\kappa B}, \quad (5.77)$$

$$u_\tau = \frac{\kappa U_P}{\ln(y^+ E)}, \quad (5.78)$$

oder anhand experimenteller Untersuchungen als

$$u_\tau = C_\mu^{1/4} \sqrt{\tilde{k}} \quad (5.79)$$

definiert werden.

Werden (5.78) und (5.79) kombiniert bekommt man folgenden Ausdruck für die Wandschubspannung

$$\tau_w = \bar{\rho} C_\mu^{1/4} \sqrt{\tilde{k} \frac{\kappa U_P}{\ln(y^+ E)}}. \quad (5.80)$$

Berechnet man den Gradient der wandparallelen mittleren Geschwindigkeit entlang der wandnormalen Richtung im Bezug auf  $u_\tau$ , so erhält man

$$\left( \frac{\partial U_P}{\partial n} \right) = \frac{u_\tau}{\kappa n} = \frac{C_\mu^{1/4} \sqrt{\tilde{k}}}{\kappa n}, \quad (5.81)$$

und der Produktionsterm wird wie folgt definiert:

$$P_k = \bar{\rho} \frac{C_\mu^{1/2} \tilde{k} U_P}{n \ln(y^+ E)}. \quad (5.82)$$

Der Produktionsterm wird zu dem Quellterm der  $\tilde{k}$ -Gleichung addiert. Der diffusive und konvektive Fluss durch die feste Wand ist gleich Null. Die Berechnung der Dissipationsrate wird im weiteren beschrieben.

**Dissipationsrate** Aufgrund des Gleichgewichts zwischen Produktion und Dissipation der turbulenten Energie, wird die  $\varepsilon$ -Gleichung in dem nächsten zu der Wand gelegenen Kontrollvolumen nicht gelöst. Die Dissipation wird wie folgt definiert:

$$\varepsilon = \frac{C_\mu^{3/4} \tilde{k}^{3/2}}{\kappa n}. \quad (5.83)$$

### 5.4 Randbedingungen für die G-Gleichung

Für alle Randbedingungen der G-Gleichung gelten Neumann-Randbedingungen in der Form

$$\frac{\partial \tilde{G}}{\partial n} = 0. \quad (5.84)$$

Eine Ausnahme stellen die Bedingungen am Eintrittsrand dar, sofern die Flammenfront durch eine Pilotflamme verankert ist. In diesem Fall wird für den Eintrittsrand das G-Feld vorgegeben, so dass  $G_0$  am Stabilisierungspunkt fest gehalten wird.

# 6 Anwendungen

In diesem Abschnitt wird die Tauglichkeit des hergeleiteten Kopplungsmodells auf der Basis des G-Gleichungsmodells zur Beschreibung der Vormischverbrennung untersucht. Der erste Fall ist die Simulation einer pilotierten vorgemischten Jetflamme. Die zweite untersuchte Konfiguration stellt eine offene verdrallte Flamme dar. Die Komplexität dieser Strömung ist vergleichbar mit der in den realen Gasturbinenbrennkammern. Da ein Einfluss der Umgebungsluft auf das Äquivalenzverhältnis im Experiment beobachtet wurde, werden beide Flammen als teilvorgemischt betrachtet.

## 6.1 Pilotierte Vormischflamme

Im vorliegenden Kapitel werden die Ergebnisse der Simulation einer turbulenten, pilotierten Vormischflamme diskutiert. Experimentell untersucht wurde die Flamme von Chen et al. [19]. Die Messergebnisse beinhalten Geschwindigkeitsfelder, die mittels Laser-Doppler Anemometrie gemessen wurde, sowie skalare Felder wie Temperaturen und Verteilungen der Haupt- und Nebenspezies bzw. von Radikalen ( $\text{CH}_4$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{OH}$ ), die über eine Kombination aus der Raman/Rayleigh-Technik und der laserinduzierten Prädissoziations-Fluoreszenz ermittelt wurden.

### 6.1.1 Konfiguration und Randbedingungen

Die untersuchte Konfiguration entspricht der im Experiment mit F2 bezeichneten Konfiguration, die sich durch eine auf den zentralen Massenstrom bezogene Austrittsgeschwindigkeit von  $U_0=50$  m/s auszeichnet und einer Reynolds-Zahl  $Re=39400$  entspricht. Die Flamme ist auf Grund der am Rohraustritt vorliegenden chemischen und turbulenten Zeit- und Längenskalen dem Bereich der dünnen Reaktionszonen zuzuordnen, was experimentell durch die Beobachtung einer verbreiteten Vorwärmzone der Flammenfront, verursacht durch die eindringenden turbulenten Wirbel, bestätigt werden konnte.

Die Abbildung 6.1a stellt die Prinzipskizze des pilotierten Vormischbrenners dar und die Abbildung 6.1b präsentiert das Rechengebiet. Hierbei wird durch das Zentralrohr mit dem Durchmesser  $D=12$  mm stöchiometrisch vorgemischtes  $\text{CH}_4$ -Luft Gemisch in die Umgebung eingedüst, das stromabwärts reagiert und eine im Mittel stationäre



Flammenfront ausbildet. Zur Stabilisierung der Flamme wird um das zentrale Rohr herum eine perforierte Platte mit Außendurchmesser  $d_p=68$  mm mit insgesamt 1175 stöchiometrischen Pilotflämmchen angeordnet, die bei der Simulation als eine über den Ringspalt homogene Pilotflamme betrachtet wurden.

Das Rechengebiet für die Simulation dieser Flamme stellt ein Zylinder dar. Das Rechengebiet mit 400mm Durchmesser und 500mm lang wurde mit 345000 Kontrollvolumen aufgelöst (Abb. 6.1b). Die Eintrittsrandbedingungen basieren auf den Messdaten in der axialen Höhe von  $x=0.5$  mm über dem Brenner. Die Geschwindigkeit der kalten Pilotströmung ist  $u_p=0.22$  m/s. Im reagierenden Fall entspricht die Pilotgeschwindigkeit dem Wert  $u_p=1.716$  m/s, was durch multiplizieren

mit dem Dichteverhältnis  $\frac{\rho_u}{\rho_b}=7.8$  bekommen wurde. Die Randbedingungen für die

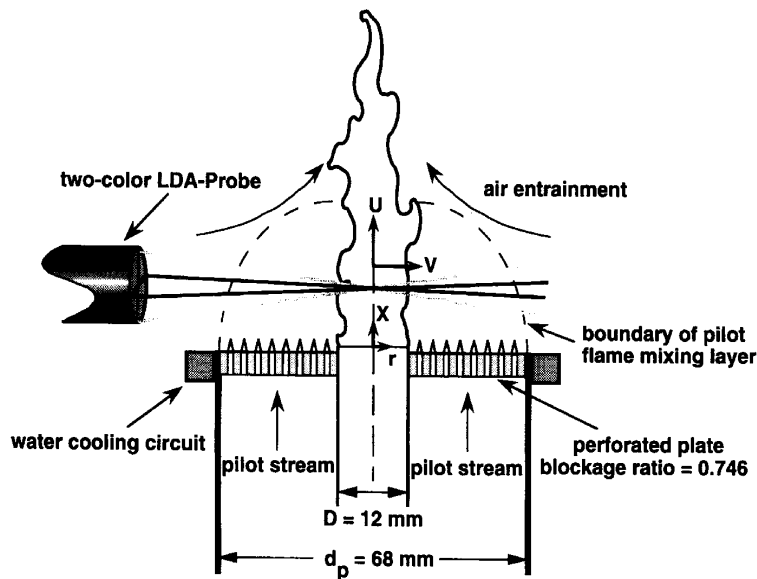
Dissipationsrate wurde mit dem Ansatz  $\tilde{\varepsilon} = \frac{C^{3/4} \tilde{k}^{3/2}}{l_t}$  definiert, wobei für das

zentrale Rohr das integrale Längenmaß  $l_t=0.002$  m, den Messdaten entsprechend eingesetzt wurde. Im Bereich der Pilotflamme wurde  $l_t=0.1(d_p-D)$  angenommen. Als Turbulenzmodell wurde das Standard  $k-\varepsilon$ -Modell verwendet. Um den Einfluss der G-Gleichung auf die Ergebnisse zu untersuchen wurden hier die Simulationen sowohl mit ILDM Modell ohne Kopplung zu der G-Gleichung als auch mit dem konditionierten ILDM-Modell durchgeführt. Die Modellkombinationen sind noch ein mal in der Tabelle 6.1 zusammengefasst.  $G_0=0$  wurde am Stabilisierungsort definiert.

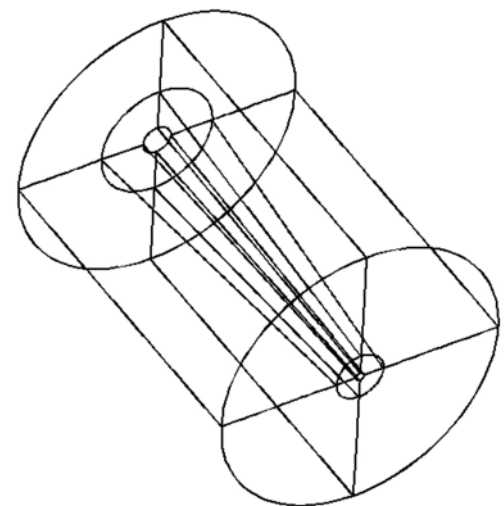
Für den Mischungsgrad wurde  $\tilde{\xi}=0.55$  sowohl im zentralen Rohr als auch im Pilotbereich eingesetzt. In den Fällen, wo das ILDM Modell verwendet wurde, besitzen die Massenbrüche von  $\text{CO}_2$  und  $\text{H}_2\text{O}$  im Pilotflammenbereich stöchiometrische Werte ( $Y_{\text{CO}_2,p} = Y_{\text{CO}_2,p}^b = 0.138, Y_{\text{H}_2\text{O},p} = Y_{\text{H}_2\text{O},p}^b = 0.12$ ). In der folgenden Abbildungen sind alle Größen in normierter Form aufgetragen. Die hierzu verwendeten Normierungsfaktoren sind für die Geschwindigkeit  $U_0=50$  m/s, für die kinetische Energie  $\tilde{k}_0=10.8$  m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup>, die normierte Temperatur wird gemäß  $\tilde{T}^* = (\tilde{T} - T_u)/(T_b - T_u)$  definiert, wobei  $T_b=2248$  K die adiabate Verbrennungstemperatur ist, und die Temperatur des kalten Gemischs  $T_u=298$ K ist.

**Tabelle 6.1.** Modellkombinationen

Fall	Turbulenzmodell	Chemiemodell	Kopplung zur G-Gleichung
1	k-epsilon	ILDM	-
2	k-epsilon	Gleichgewicht	+
3	k-epsilon	ILDM	+



**Abbildung 6.1a:** Prinzipskizze des pilotierten Vormischflamme



345000 KV

**Abbildung 6.1b:** Darstellung des Rechengebiets

### 6.1.2 Ergebnisse und Diskussion

Zuerst werden die Ergebnisse der Simulation einer isothermen Strömung dargestellt. Hierfür wird für den zentralen Freistrah und die Pilotflamme ein nicht reagierendes Gemisch vorgegeben, so dass die Konfiguration einem reinen Mischungsproblem entspricht. Die Abbildung 6.2 stellt die Ergebnisse der isothermen Simulation dar. Hier werden radiale Profile der mittleren Axialgeschwindigkeit und kinetischen Energie präsentiert. Hierbei ist zu erkennen, dass so wohl die Axialgeschwindigkeit als auch turbulente kinetische Energie bis zur axiale Position  $x/D=6.5$  nahezu konstant bleibt. Im weiteren axialen Verlauf fallen die Werte für  $\tilde{u}$  und  $\tilde{k}$  ab. An diesem Verhalten ist ein typischer Freistrahverlauf zu erkennen.

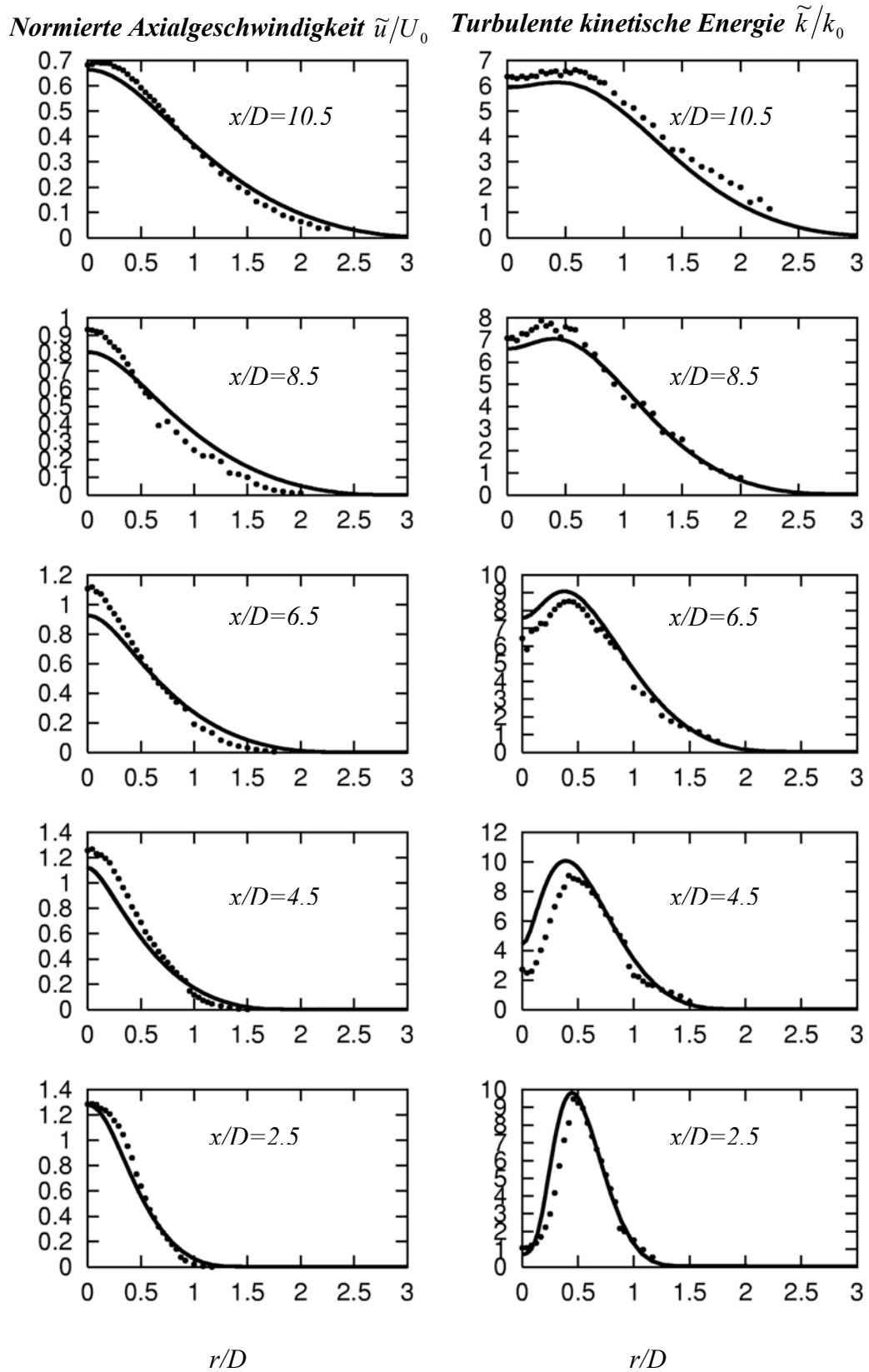
Die Simulation der reagierenden Strömung wurde mit bereits reagiertem Gemisch für die Pilot Flamme durchgeführt, das zur kontinuierlichen Zündung der durch zentrale Düse zugeführten Methan-Luft Mischung führt. Im Weiteren werden die Ergebnisse der Simulation dargestellt. Es werden die Messdaten mit Simulationen ohne bzw. mit Kopplung des Chemiemodells zur G-Gleichung verglichen. Die Abbildung 6.3 stellt die radialen Verläufe der normierten axialen Geschwindigkeit und der turbulenten kinetischen Energie dar. Der relativ konstante Verlauf der gemessenen Kurven unterscheidet sich von dem isothermen Fall. Die chemische Reaktion, die in der Scherschicht zwischen Freistrah und Pilotflamme stattfindet, verursacht die Dichteänderung und eine daraus resultierende Volumenexpansion, wodurch sich die Strömung innerhalb der Scherschicht nach oben und nach außen beschleunigt, so dass das kalte Gas des Freistrahls von heißen Gasen der Pilotflamme umschlossen

wird. Durch die Einmischung von Fluid aus den Verbrennungsprodukten der Pilotflamme und aus der Umgebungsluft in den zentralen Freistrahls bleibt der Potentialkern des Freistrahls länger erhalten. Eine Abweichung zwischen den beiden Simulationen und dem Experiment insbesondere bis Axialposition  $x/D=6.5$  und in dem Scherschichtbereich ( $r/D>0.5$ ) ist festzustellen. Dieser Effekt ist auf die überschätzte Temperatur zurückzuführen (siehe Abbildung 6.4).

In der Ebene  $x/D=2.5$  ist die gemessene Position des steilsten Gradienten der Temperatur (Abb. 6.4), die als Ort der Reaktionszone betrachtet werden kann, auf der radialen Position  $r/D=0.7$  angeordnet. Die Rechnungen mit dem Gleichgewichtsmodell weisen eine radial etwas weiter nach innen liegende Position auf ( $r/D=0.5$ ). Im Fall der ILDM-Chemie (mit und ohne Konditionierung) stimmt die Position der Reaktionszone überein, obwohl die Simulationen einen höheren Gradienten zeigen. Weiter die Achse entlang zeigen die Messungen einen Anstieg der Temperatur auf den Gleichgewichtswert, die Position der Reaktionszone verschiebt sich nur leicht nach innen. Die Simulation mit ILDM-Chemie ohne G-Gleichung zeigen ab Position  $x/D=6.5$  eine stärkere Verschiebung zur Achse hin, was auf eine schmalere Flamme hindeutet. Die Rechnungen mit G-Gleichung hingegen zeigen eine bessere Übereinstimmung mit den Messdaten. Die Position der Flammenfront auf der Achse bei den Simulationen ohne G-Gleichung liegt zwischen Axialposition  $x/D=8.5$  und  $x/D=10.5$ . Mit Konditionierung erreicht man einen langsameren Anstieg der Temperatur auf der Achse, was den Messungen entspricht. Der Vergleich der Massenbrüche der Fortschrittsvariablen  $\text{CO}_2$  und  $\text{H}_2\text{O}$  (siehe Abbildung 6.6) veranschaulicht diese Aussage. Mit der Konditionierung kann die Bewegung der beiden Hauptspezies besser beschrieben werden.

In den Abbildungen 6.5-6.7 wurde auch der Einfluss der kinetischen Effekte untersucht. Hierfür werden die Ergebnisse der Simulationen mit konditionierter Gleichgewichtschemie und konditionierter ILDM-Chemie und nichtkonditionierter ILDM-Chemie verglichen. Im Fall der nichtkonditionierten ILDM-Chemie werden die Reaktanden  $\text{O}_2$  und  $\text{CH}_4$  sehr schnell abgebaut, was auf die mit diesem Modell unterschätzte Flammendicke und Flammenlänge zurückzuführen ist.

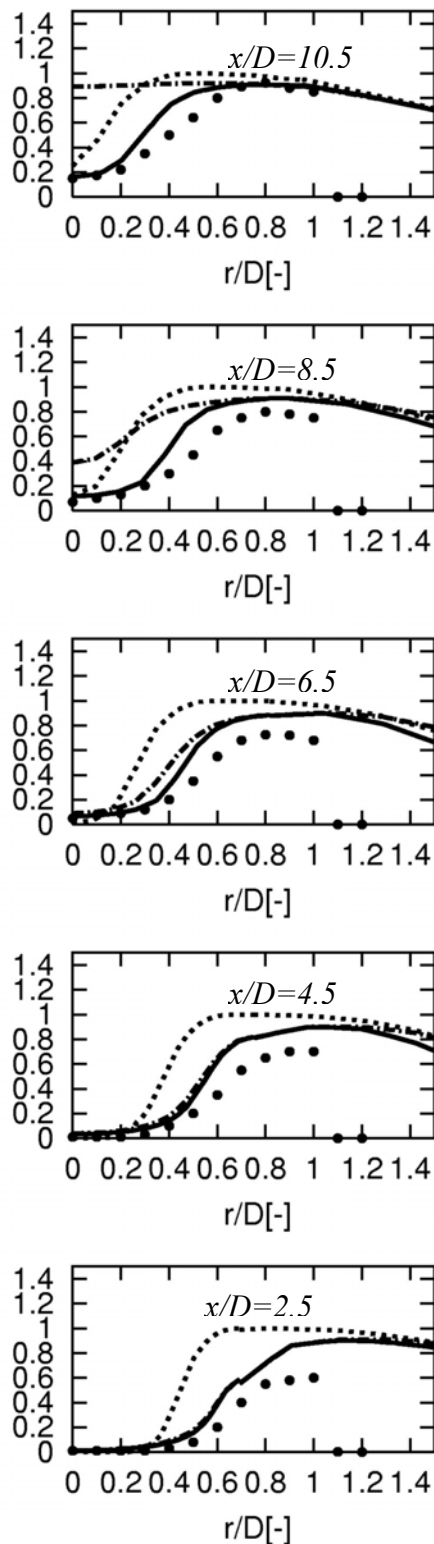
Wie erwartet wurden die Minorspezies  $\text{CO}$  und  $\text{OH}$  insgesamt am besten mit der konditionierten ILDM-Chemie betrachtet, obwohl auch da eine relativ große Diskrepanz zu sehen ist. Die  $\text{CO}$ - und  $\text{OH}$ -Profile, die mit Gleichgewichtschemie bekommen wurden, zeigen einen glatteren Verlauf als die mit den ILDM-Chemie, obwohl sie quantitativ unterschätzt sind. Da bei der Konditionierung die Flammenposition besser vorhergesagt wird, erreicht man mit dem konditionierten ILDM-Chemie Modell einen genauen qualitativen Verlauf der  $\text{CO}$ - und  $\text{OH}$ -Konzentrationen. Leider spiegeln die  $\text{CO}$ -Simulationsergebnisse die Werte im Postflammenbereich nicht korrekt wieder. Hingegen werden die  $\text{OH}$ -Konzentrationen gut wiedergegeben.



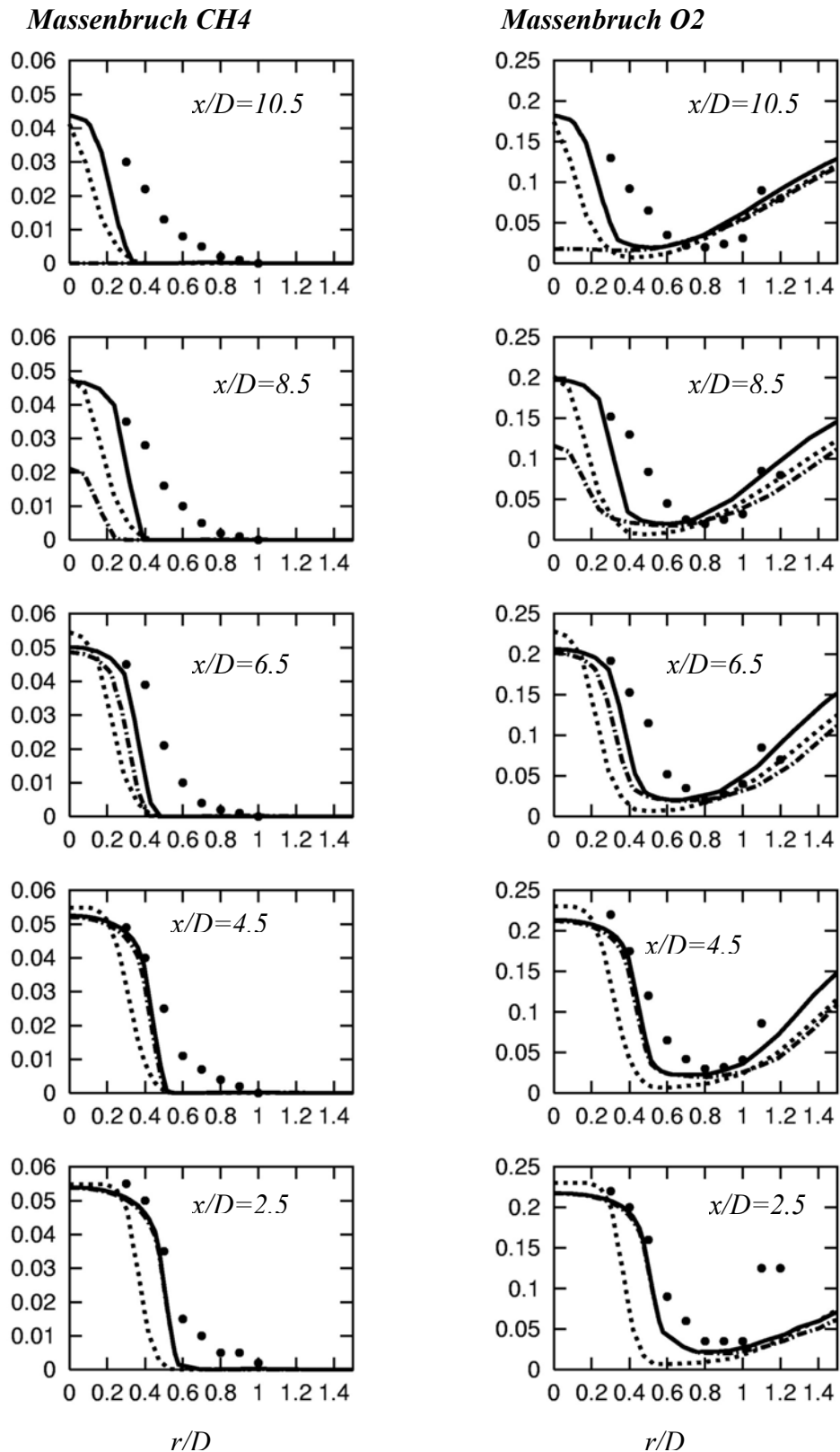
**Abbildung 6.2:** Konfiguration F2 isotherm: Normierte radiale Verläufe der Axialgeschwindigkeit  $\tilde{u}/U_0$  und der turbulenten kinetischen Energie  $\tilde{k}/k_0$ : Linie-Simulation, Punkte-Experiment.



Normierte Temperatur  $\tilde{T}^*$

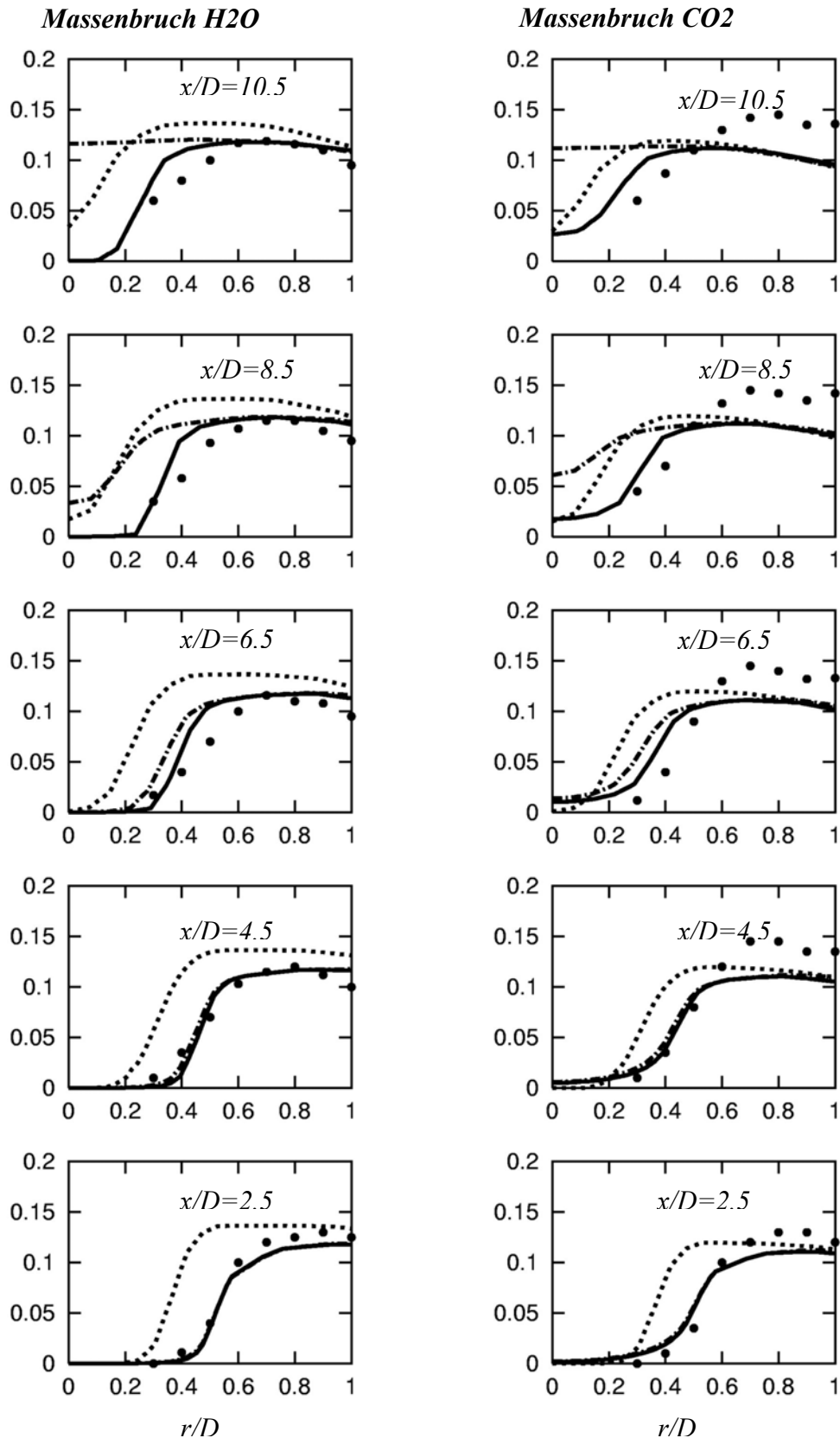


**Abbildung 6.4:** Konfiguration F2 reagierend: Normierte radiale Verläufe der Temperatur: — ILDM ohne G-Gleichung, — ILDM mit G-Gleichung, ..... Gleichgewichtsschemie mit G-Gleichung, ● Experiment.



**Abbildung 6.5:** Radiale Verläufe der Massenbrüche CH<sub>4</sub> und O<sub>2</sub>.

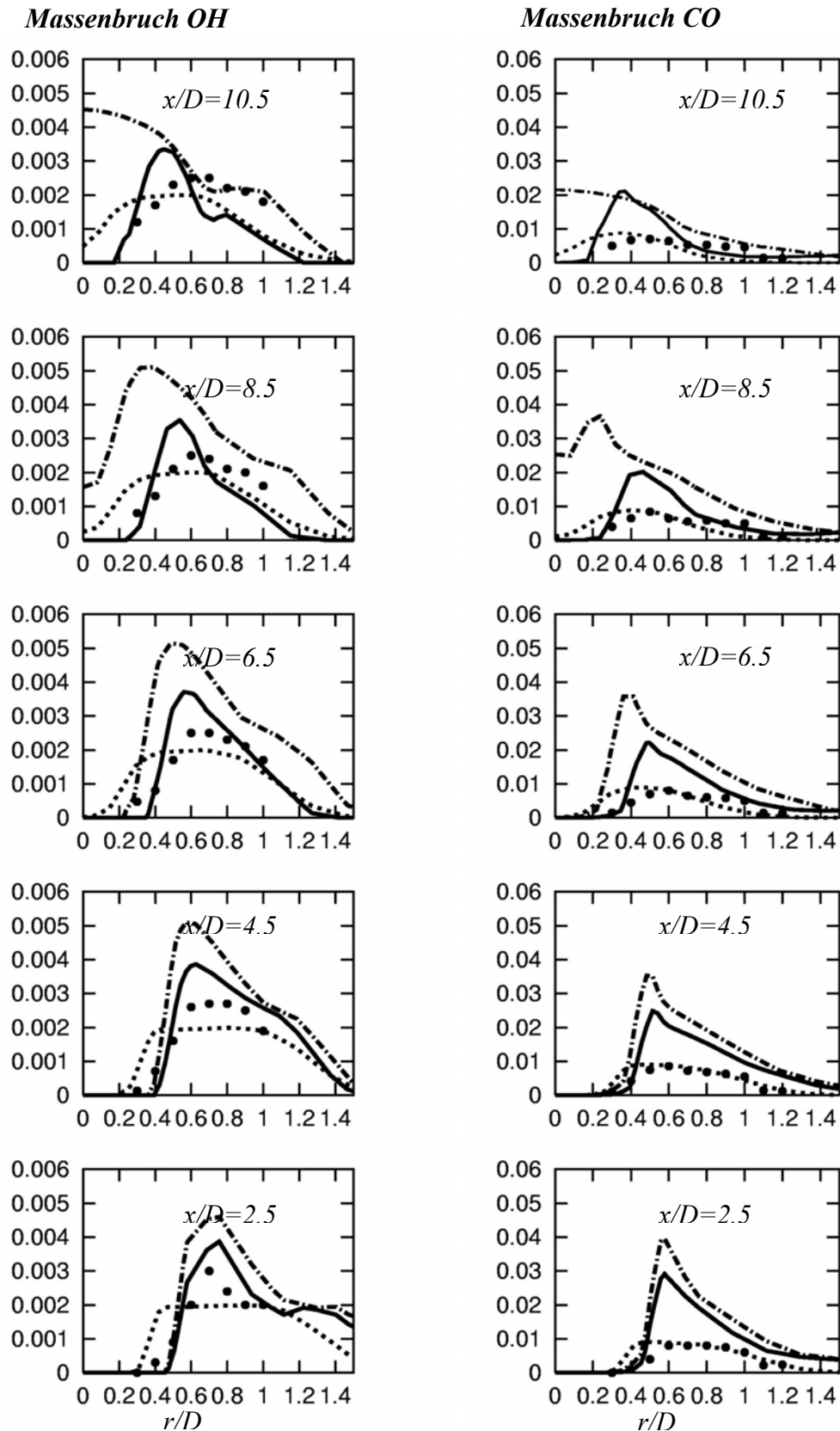
— · — · — ILDM ohne G-Gleichung, — ILDM mit G-Gleichung,  
 ..... Gleichgewichtsschemie mit G-Gleichung, • Experiment



**Abbildung 6.6:** Radiale Verläufe der Massenbrüche CO<sub>2</sub> und H<sub>2</sub>O.

— · — · — ILDM ohne G-Gleichung, — ILDM mit G-Gleichung,  
 ..... Gleichgewichtschemie mit G-Gleichung, • -Experiment





**Abbildung 6.7:** Radiale Verläufe der Massenbrüche CO und OH:

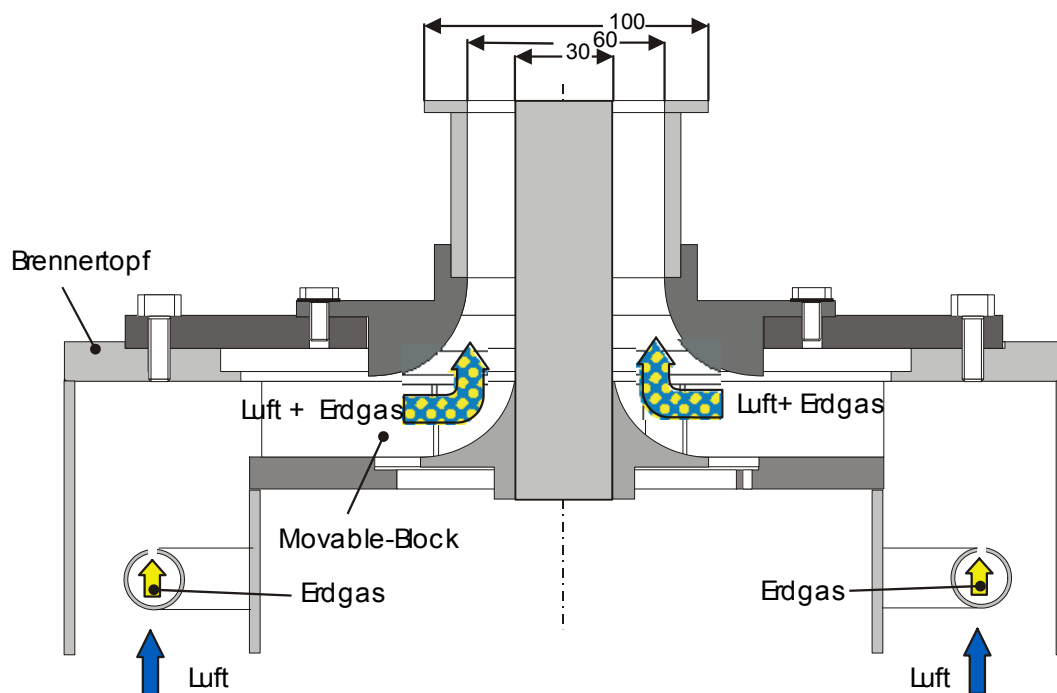
— · — · — ILDM ohne G-Gleichung, — ILDM mit G-Gleichung,  
 ..... Gleichgewichtsschemie mit G-Gleichung, • -Experiment

Zusammengefasst spricht der Vergleich der hier dargestellten Modelle für die Kombination der ILDM-Chemie mit der G-Gleichung. Allerdings muss man erwähnen, dass die Simulationen mit der G-Gleichung, durch die relativ aufwändige Lösung mit der *Level-set*-Methode, einen größeren Aufwand an Rechenzeit brauchen. Der Mehraufwand liegt ungefähr um Faktor 2 höher als die Rechnung ohne G-Gleichung. Der überwiegende Vorteil des Modells ist die korrekte Vorhersage der Flammenstruktur und die darauskommende Verteilung der Temperatur und der Spezies.

### 6.2 Verdrallte Vormischflammen

Dieser Abschnitt stellt die Ergebnisse der Simulation einer Drallflamme dar. Diese komplexe, mit der in einer realen Gasturbine vergleichbaren Konfiguration wurde experimentell in [111] untersucht.

#### 6.2.1 Konfiguration und Randbedingungen



**Abbildung 6.8:** Konfiguration des Drallbrenners.

Die Konfiguration des Drallbrenners ist in Abbildung 6.8 dargestellt. In den von unten zuströmenden Luftstrom wird das Erdgas durch eine Ringleitung zugemischt. Nach einer 90° Umlenkung durchströmt das Gemisch den Moveable-Block-Drallerzeuger. Nach einer weiteren 90° Umlenkung erfolgt dann der Austritt des Gemisches durch einen Ringspalt mit einem Außendurchmesser von 60 mm und einer Breite von 15

mm. Der Brenner ist mit einem coaxialen Luftstrom mit einer mittleren Geschwindigkeit von 0.5 m/s umgeben. Die Geschwindigkeiten wurden mittels Ein-Punkt LDA-Messtechnik durchgeführt. In dieser Arbeit wurden zwei Konfigurationen- 30 KW und 150KW, jeweils isotherm und reagierend, untersucht. Die wichtigsten Strömungsdaten sind in der Tabelle 6.2 zusammengefasst.

Die durch das Experiment in isothermen Strömungen beobachteten instationären Effekte wurden in reagierenden Fällen nicht festgestellt. Diese Arbeit konzentriert sich auf der Simulation der Verbrennung, daher wurden alle dargestellten Konfigurationen mittels stationärer RANS simuliert.

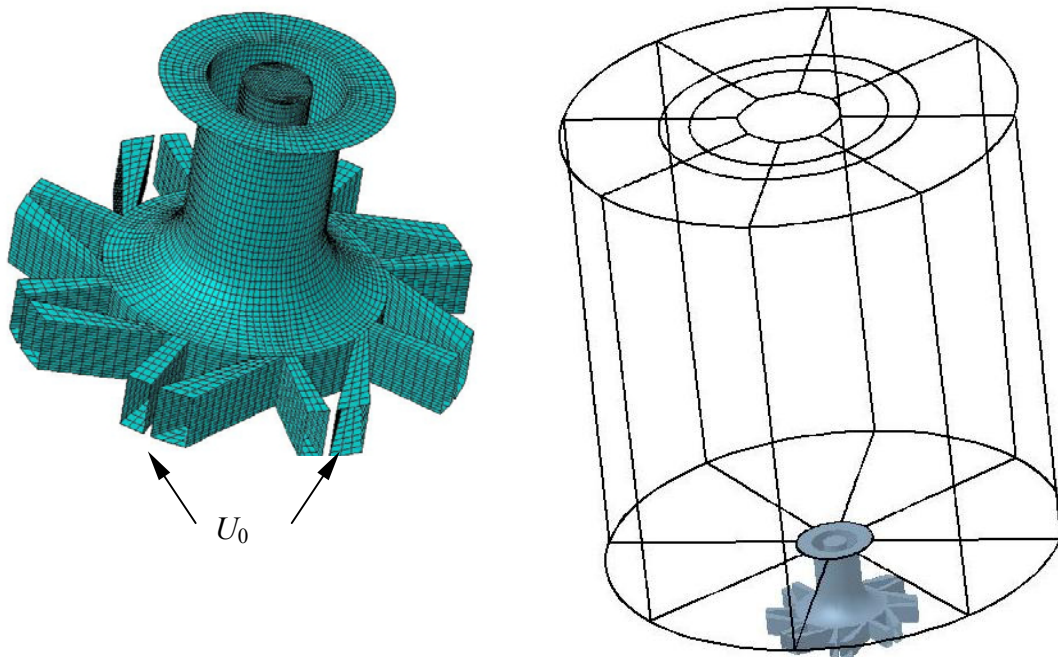
Abbildung 6.9 stellt das Rechengebiet dar. Auf der linken Seite ist die Brennerkonfiguration und die Gitterauflösung skizziert. Die rechte Seite stellt das ganze Rechengebiet dar. Der zylindrische Teil des Rechengebiets hat 0.6 m Durchmesser und ist 0.72 m lang. Das ganze Rechengebiet wurde mit ca. 700000 Kontrollvolumen aufgelöst.

Die turbulente Strömung wurde mit dem  $k-\varepsilon$  Modell simuliert. Der thermochemische Zustand im verbrannten Bereich wurde durch Kopplung mit Gleichgewichtschemie definiert.

Eine konstante Radialgeschwindigkeit  $U_0$  wurde an den Eintrittskanälen eingesetzt. Sie wurde aus den entsprechenden Massenströmen ausgerechnet. Im Fall 30Iso  $U_0 = 1.98$  m/s, im Fall P30R  $U_0 = 2.18$  m/s, im Fall 150Iso  $U_0 = 9.76$  m/s und für P150R  $U_0 = 8.92$  m/s. Für die Coflow-Geschwindigkeit wurde  $U_c = 0.5$  m/s vorgegeben. Der Mischungsgrad am Brennereintritt im Fall P30R hat Wert von  $\xi = 0.0469$ , im Fall P150R beträgt  $\xi = 0.0549$ . Für den Co-flow  $\xi = 0.0$  in beiden Fällen. Die initialisierte  $G_0$ -Isofläche wurde in der Höhe von 3 mm über dem Brennermund gelegt und das gesamte  $G$ -Feld als Abstandfunktion initialisiert. Die Eintrittsbedingungen für die turbulente kinetische Energie basieren auf der Annahme homogener isotroper Turbulenz  $k = \frac{3}{2}(u')^2$ , wobei der Turbulenzgrad mit 1% vorgegeben wurde. Für die Dissipationsrate am Brennereintritt wurde das integrale Längenmaß mit  $l_t = 2$  mm vorgegeben, im Coflow ist  $l_t = 50$  mm. Da die Einsaugung von Umgebungsluft stattfindet, wird die laminare Brenngeschwindigkeit als Funktion des Mischungsgrades definiert:  $s_L = f(\xi, \xi'')$ .

**Tabelle 6.2:** Untersuchte Konfigurationen

Fall	Reakt./ohne Reaktion	Re	Massenfluss	Äquivalenz- rate	Co-flow Geschw.
30Iso	Isotherm	9680	42.72 kg/h	0	0.5 m/s
P30R	Reagierend	9970	43.84 kg/h	1.2	0.5 m/s
150Iso	Isotherm	47470	209.46 kg/h	0	0.5 m/s
P150R	Reagierend	42300	181.44 kg/h	1	0.5 m/s



**Abbildung 6.9:** Darstellung des Rechengebiets

### 6.2.2 Ergebnisse und Diskussion

Im Folgenden werden die erzielten Ergebnisse aufgezeigt. Dabei konzentriert sich die Darstellung auf die Diskussion der quantitativen und qualitativen Eigenschaften der auf Basis des G-Gleichungsmodells durchgeführten Simulationen. Die beiden isothermen Konfigurationen wurden trotz der im Experiment beobachteten instationären Effekte stationär betrachtet, da der Schwerpunkt dieser Arbeit die Simulationen der Flammen ist und die Ergebnisse der isothermen Simulationen wurden als Vorfeld für die reagierende Simulationen verwendet.

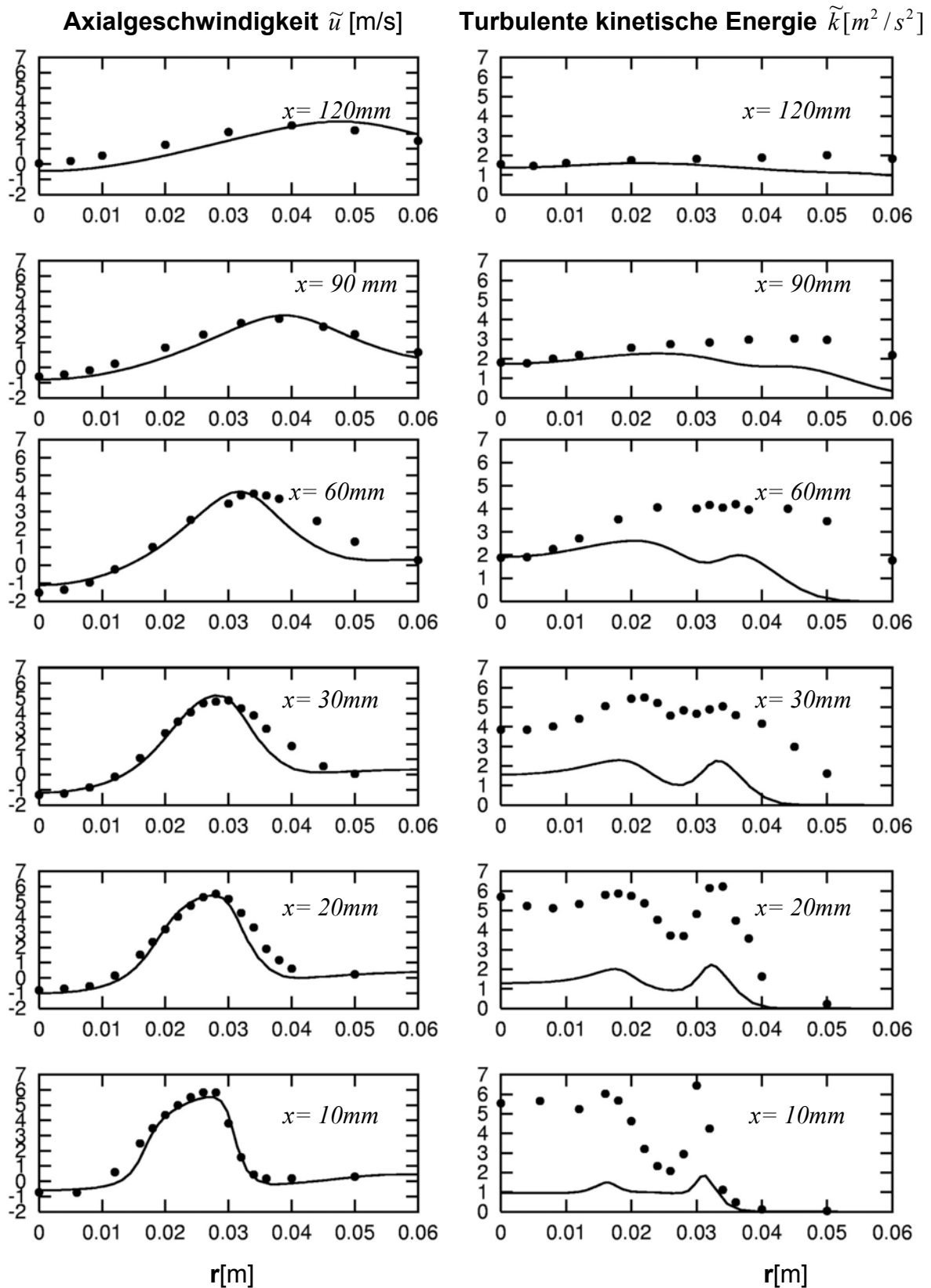
Die erste untersuchte Konfiguration entspricht dem Fall von 30kW. Zuerst werden die Ergebnisse der isothermen 30kW-Strömung diskutiert. Ein Überblick über die Modellierungsgüte bezüglich des Geschwindigkeitsfeldes und der turbulenten kinetischen Energie ist mit Hilfe der in den Abbildungen 6.10-6.11 dargestellten radialen Profile der Ergebnisse von Messungen und Rechnungen für die Ebene  $x = 10, 20, 30, 60, 90$  und  $120$  mm erhältlich. Gute Übereinstimmung zwischen Rechnung und Messung bei den mittleren Geschwindigkeiten ist erkennbar. Die Rückströmgeschwindigkeit und Länge der Rückströmzone ist auch gut wiedergegeben.

Die in der Abbildung 6.10 (rechts) gezeigte berechnete turbulente kinetische Energie ist im Vergleich zu den Messungen deutlich unterschätzt, obwohl die Lage der Scherzonen richtig simuliert wird. Die Ursache dafür sind die kohärenten Strukturen, die in der kalten Strömung auftreten und in durchgeführten stationären Simulationen

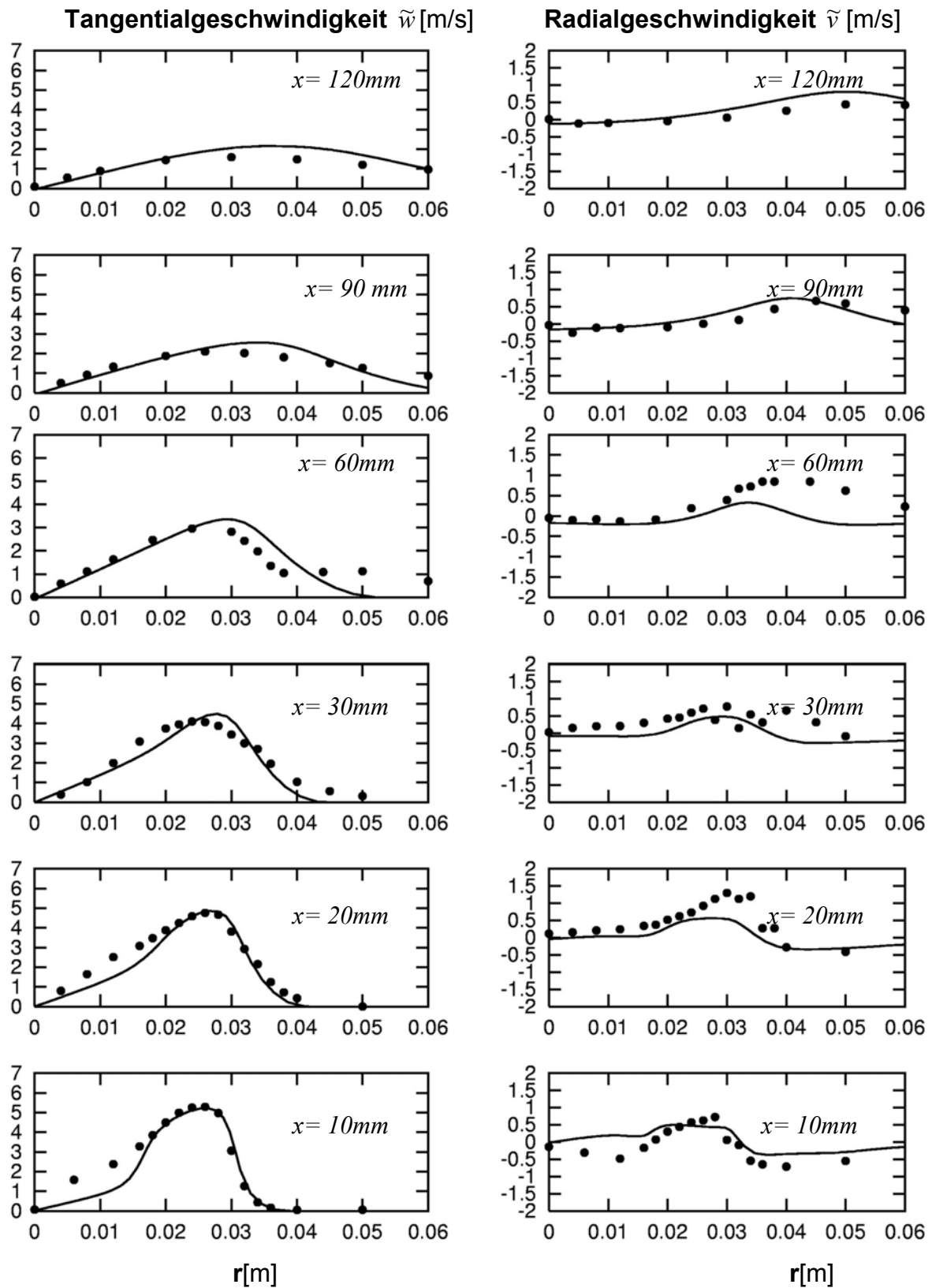
mit dem  $k-\varepsilon$  Modell nicht wiedergegeben werden. Die Untersuchungen von Jochmann et. al [43], durchgeführt auf der vergleichbaren Konfiguration, zeigen jedoch, dass bei hoher Gitterauflösung es gelingt, instationäre Effekte und koherente Strukturen auch mit URANS  $k-\varepsilon$  Modell nachzuweisen.

Die auskonvergierten Ergebnisse der isothermen Konfiguration wurden als Initialisierung der reagierenden Rechnungen benutzt. Da keine Skalarmessungen vorhanden sind, wurde nur die Kopplung des G-Gleichungsmodells mit Gleichgewichtschemie berücksichtigt. Der Schwerpunkt folgender Untersuchungen ist die korrekte Bestimmung der Flammenfrontposition und Einfluss der Verbrennung auf das Strömungsfeld. Die obere Hälfte der Abbildung 6.12 zeigt die berechnete Position der Flammenfront, die  $G=0$  entspricht (fett dargestellt). Die dünnen Linien repräsentieren andere Isolinien im Bereich von  $[-0.03\text{m} ; +0.03\text{m}]$  um die Flammenfront herum, wodurch ein Maß für die Erfüllung der Abstandsfunktion dargestellt ist. Die untere Hälfte der Abbildung 6.12 stellt die Verteilungsfunktion  $\tilde{p}^b$  dar. Der Übergangsbereich vom unverbrannten zum verbrannten Gebiet (zwischen 0 und 1) bestimmt die turbulente Flammendicke. Die Breite der turbulenten Flammendicke steigt mit zunehmendem integralen Längenmaß stromabwärts an. Die Abbildung 6.13 vergleicht die berechnete Verteilungsfunktion  $\tilde{p}^b$  mit der gemessenen. Die Messungen wurden mittels OH-PLIF durchgeführt. Die Ergebnisse für die vier Ebenen  $x=20, 30, 40$  und  $50\text{mm}$  sind vorhanden. Beim Profil  $x=20\text{mm}$  stimmt die berechnete Verteilungsfunktion  $\tilde{p}^b$  sehr gut mit den Messergebnissen überein. Weiter stromabwärts beobachtet man eine zunehmende Diskrepanz zwischen Simulationen und Messungen.

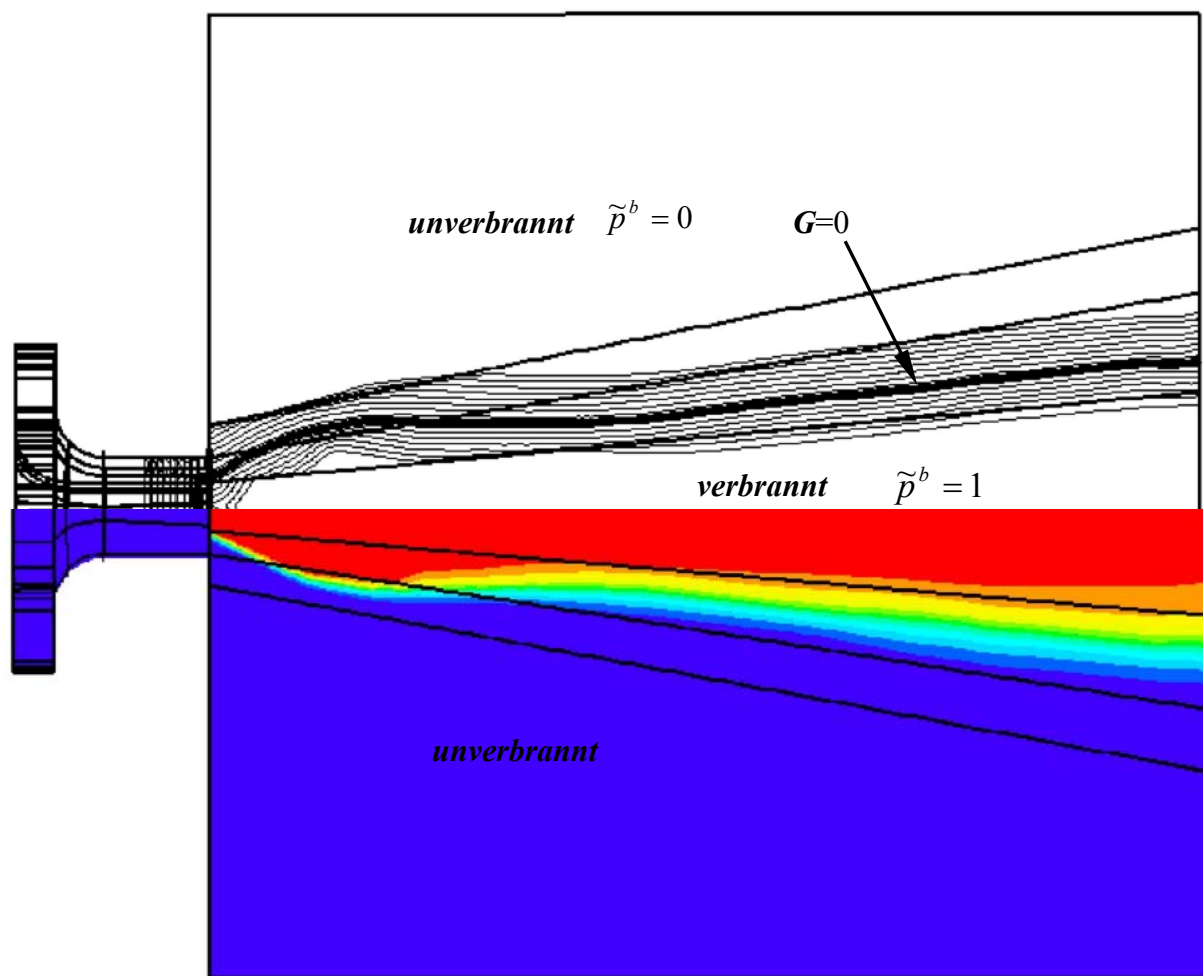
Die Abbildungen 6.14-6.15 stellen die Verläufe der mittleren Geschwindigkeiten und der kinetischen Energie dar. Die Vorhersage der mittleren Axialgeschwindigkeit bis  $x=30\text{mm}$  gelingt gut. Weiter in axialer Richtung wird die axiale Geschwindigkeit im verbrannten Bereich unterschätzt. Die berechnete Länge und Breite der Rückstromzone ist etwas überschätzt. Der Verlauf der mittleren Tangential- und Radial- Geschwindigkeit ist insgesamt zufriedenstellend wiedergegeben. Ähnlich zu den isothermen Simulationen wird der mit dem  $k-\varepsilon$  Modell vorhergesagte axiale Verlauf der turbulenten kinetischen Energie deutlich unterschätzt. Auch die Lage der ersten Scherzone ab  $x=60\text{mm}$  ist mehr nach außen verschoben. Eine mögliche Erklärung für Diskrepanzen bei der Flammenfrontposition ist in den Abweichungen der berechneten und von den gemessenen Verläufen der turbulenten kinetischen Energie zu finden und als Folge dieser Abweichungen resultieren ebenso die Abweichungen bei den berechneten mittleren Geschwindigkeiten. Die vom Mischungszustand abhängige laminare Brenngeschwindigkeit stellt einen weiteren wichtigen Einflussfaktor dar. Aufgrund fehlender



**Abbildung 6.10:** Fall 30Iso: Radiale Profile der axialen Geschwindigkeit und der turbulenten kinetischen Energie.

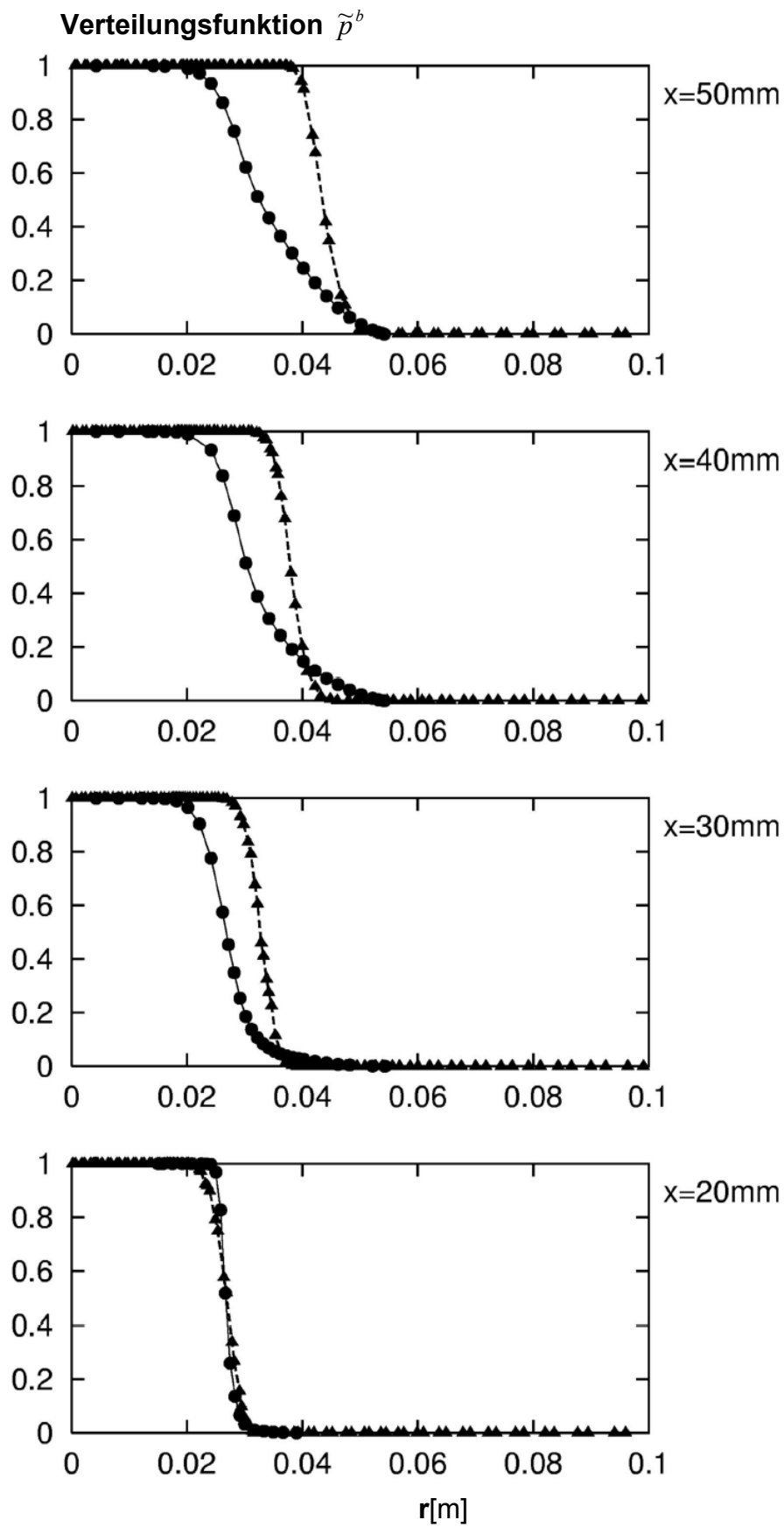


**Abbildung 6.11:** Fall 30Iso: Radiale Profile der tangentialen und radialen Geschwindigkeit.

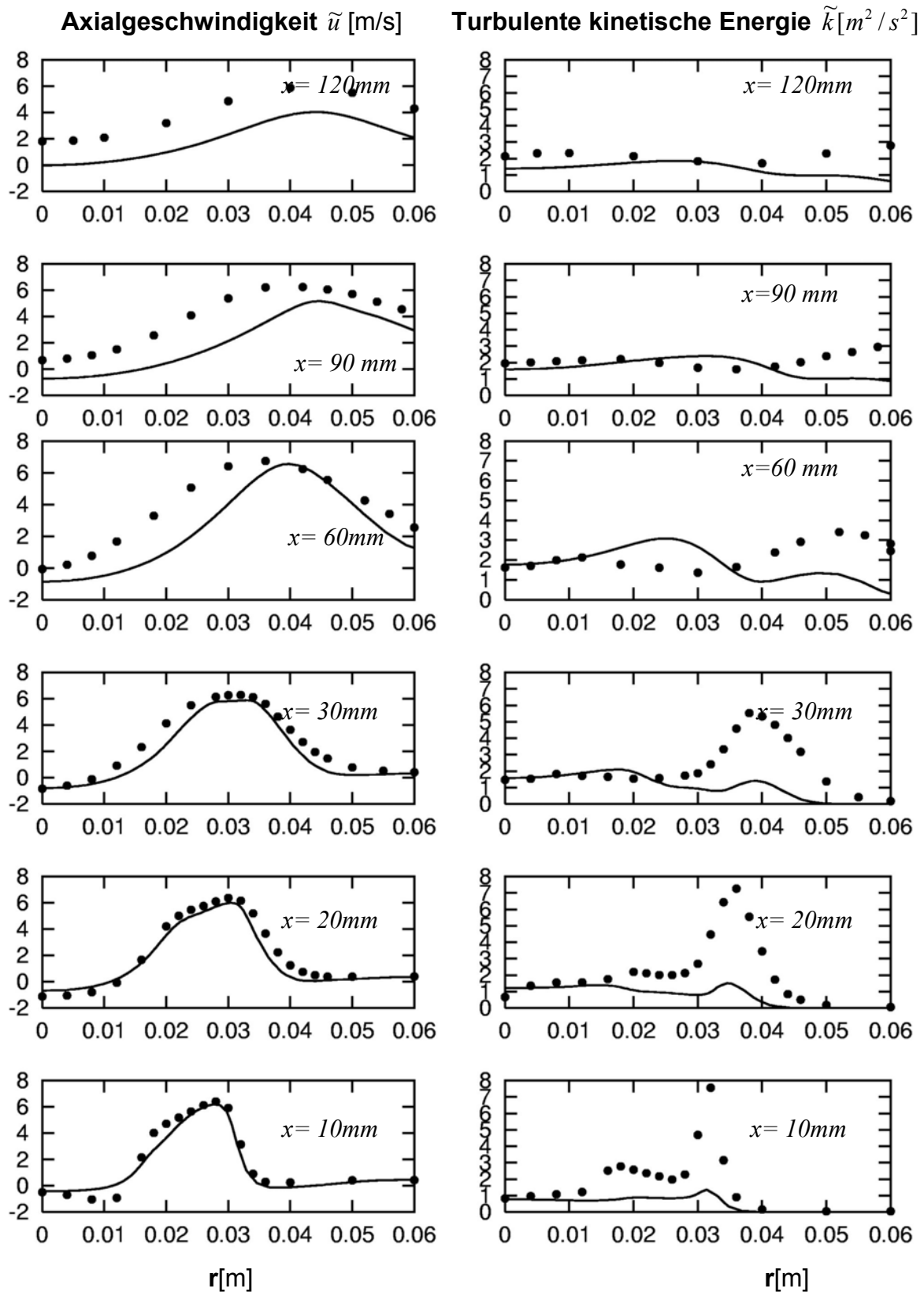


**Abbildung 6.12:** Darstellung des G-Feldes (oben). Die Flammenfront ( $G=0$ ) ist mit fetter Linie bezeichnet, die dünnen Linien stellen andere Isofläche im Bereich  $[-0.03\text{m}; +0.03\text{m}]$  dar. Die untere Hälfte stellt die Verteilungsfunktion  $\tilde{p}^b$  dar.

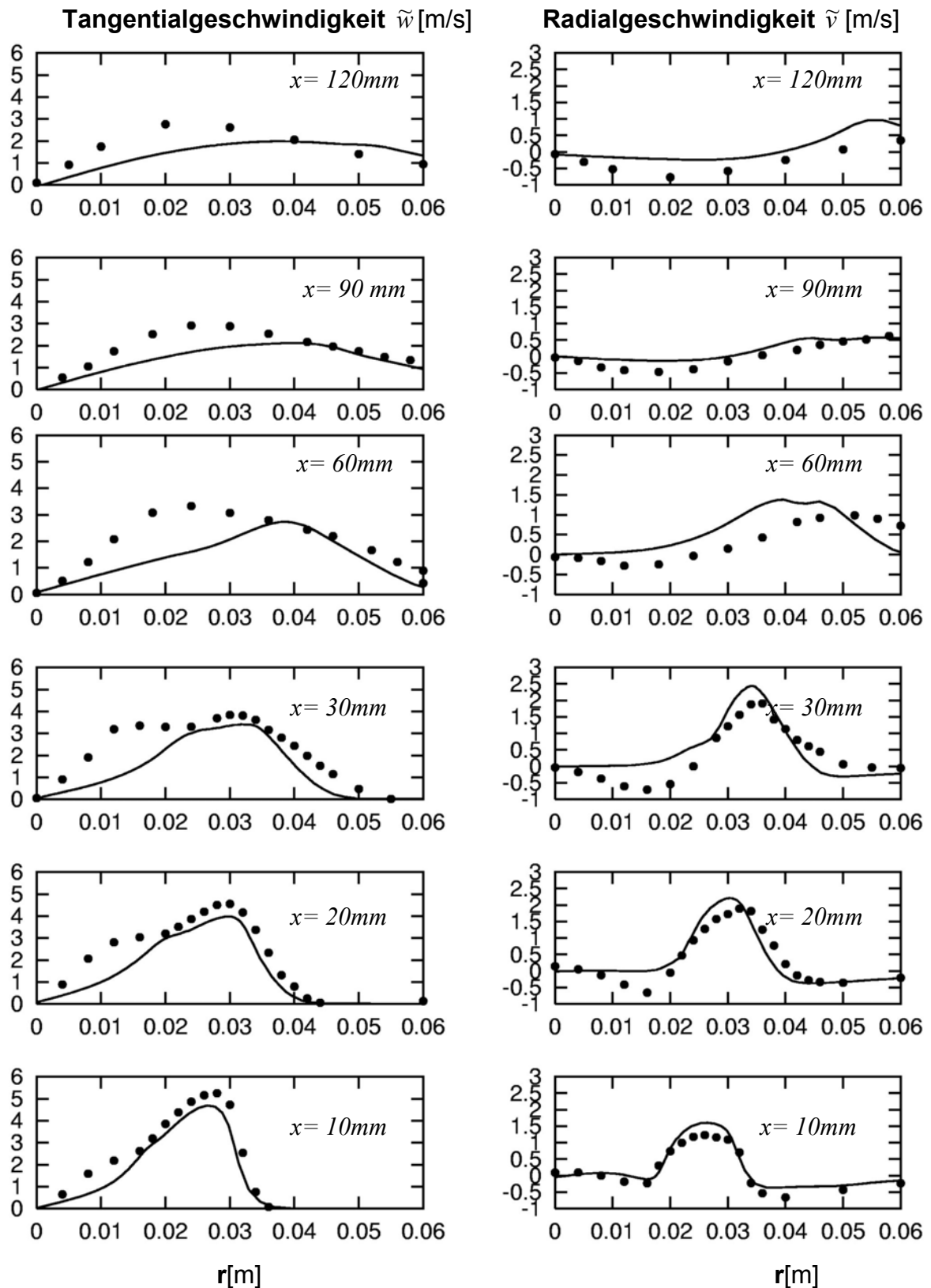




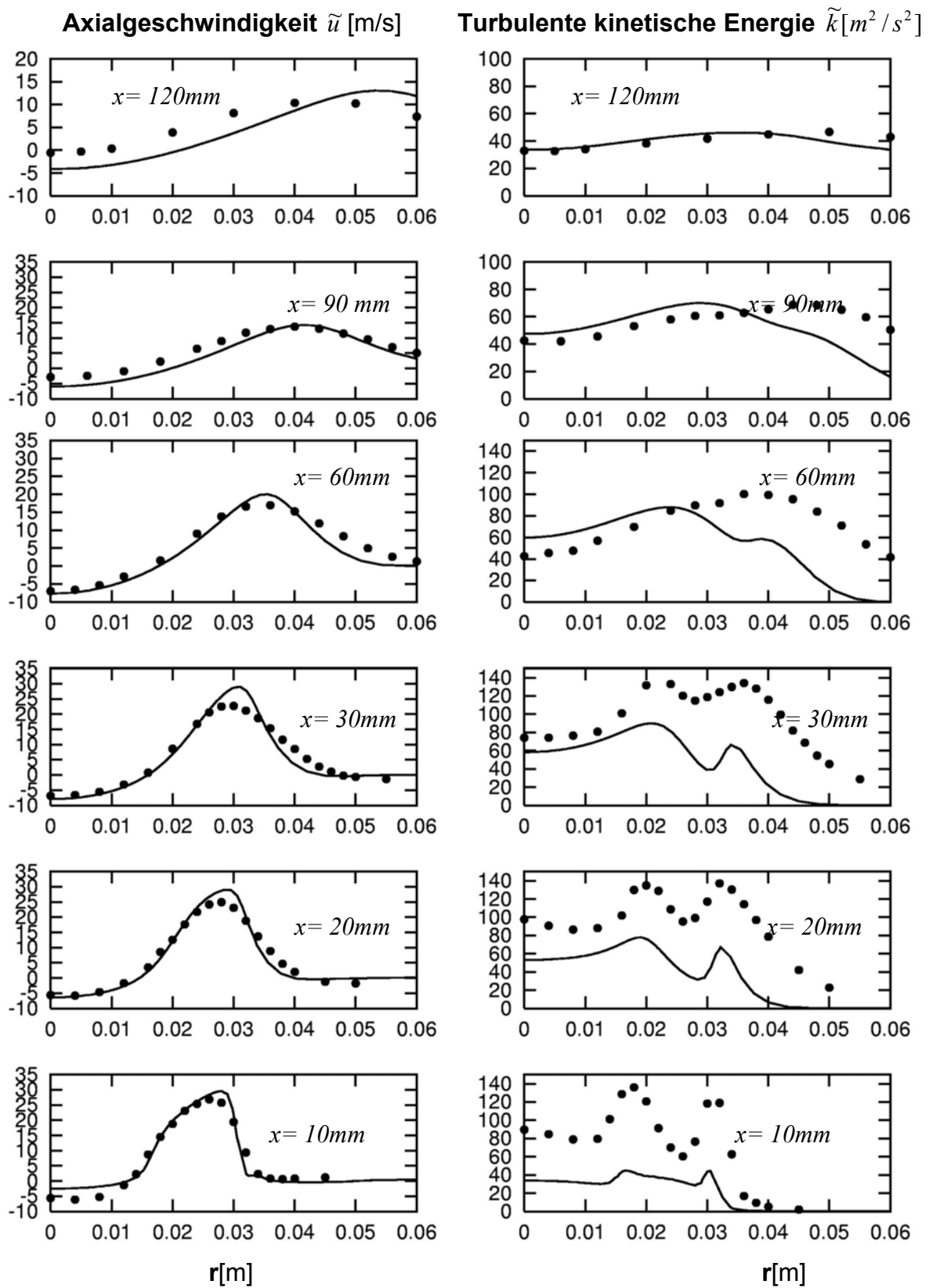
**Abbildung 6.13:** Fall P30R: Die Verteilungsfunktion der Lage der Flammenfront:  
 -▲--- -Simulationen, —●— - Experiment.



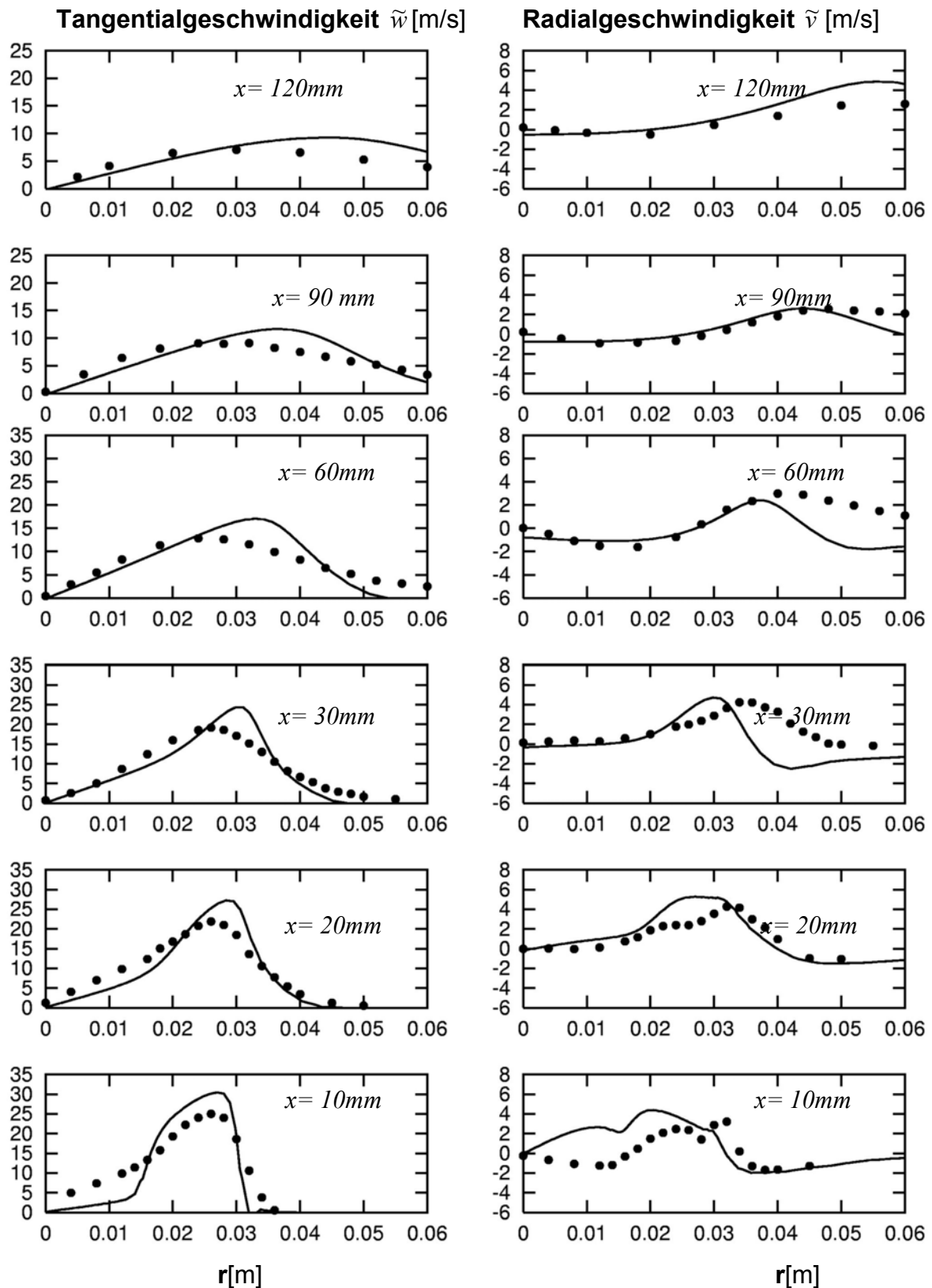
**Abbildung 6.14:** Fall P30R: Radiale Profile der axialen Geschwindigkeit und der turbulenten kinetischen Energie.



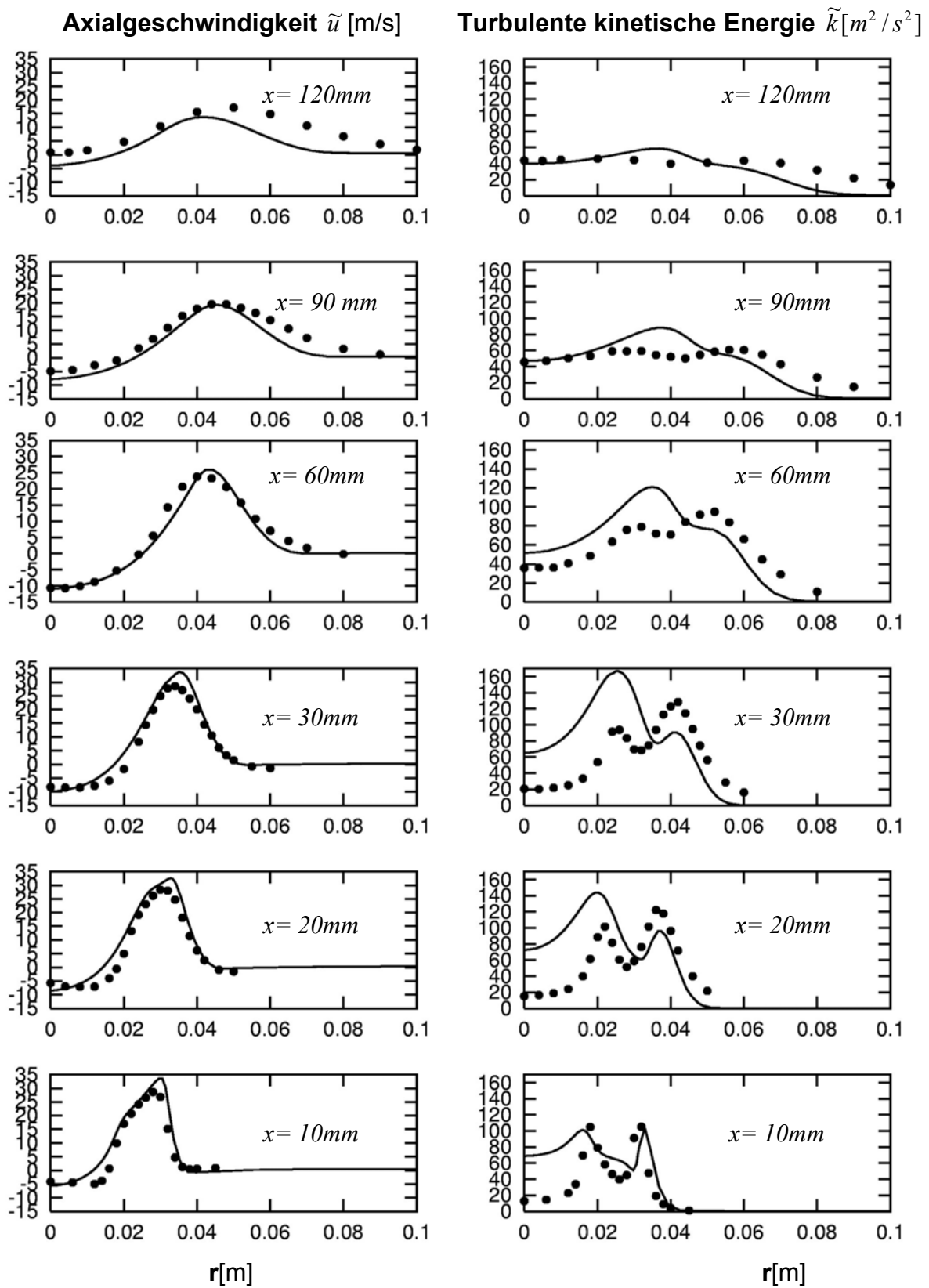
**Abbildung 6.15:** Fall P30R: Radiale Profile der tangentialen und radialen Geschwindigkeit.



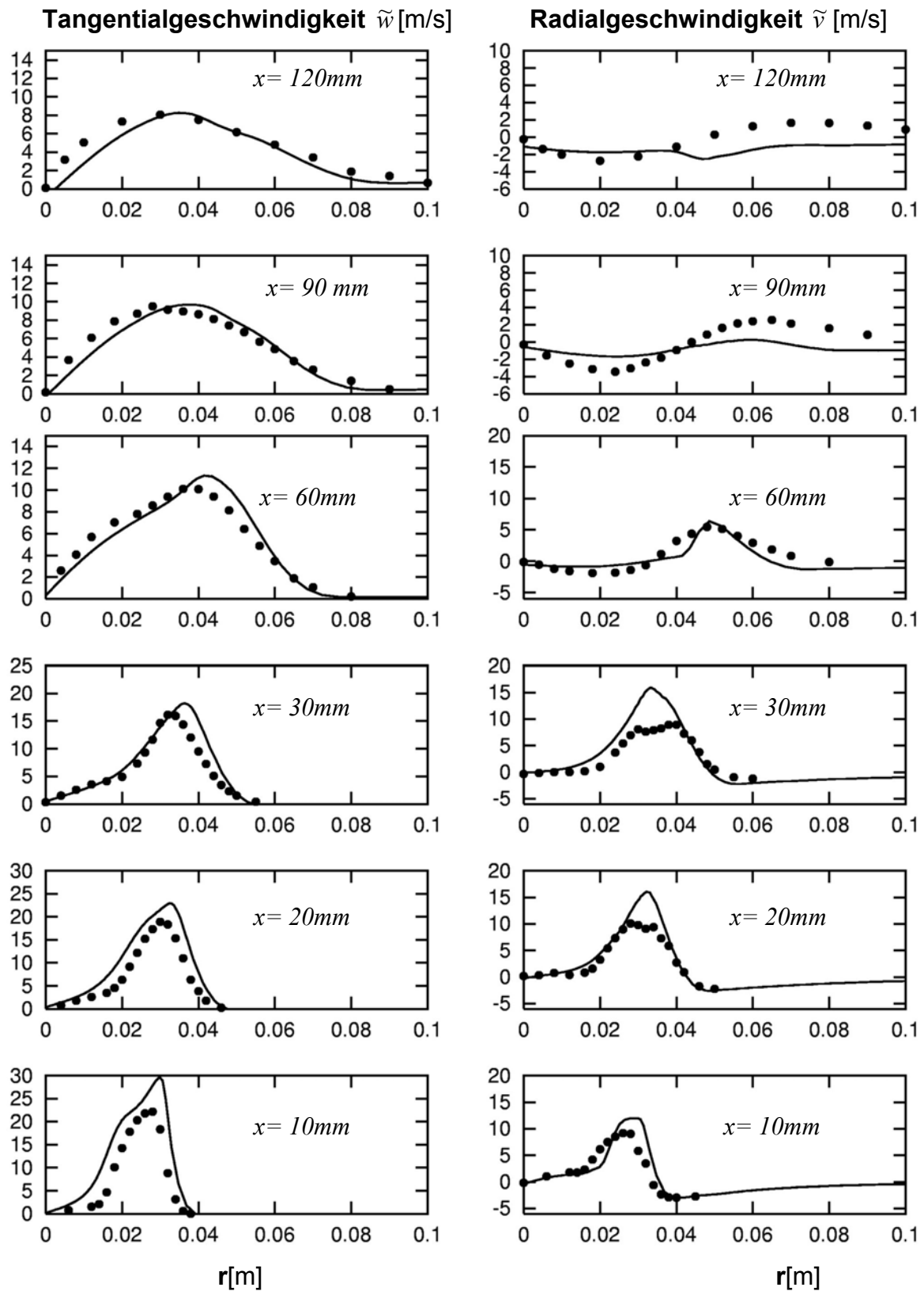
**Abbildung 6.16:** Fall 150Iso: Radiale Profile der axialen Geschwindigkeit und der turbulenten kinetischen Energie.



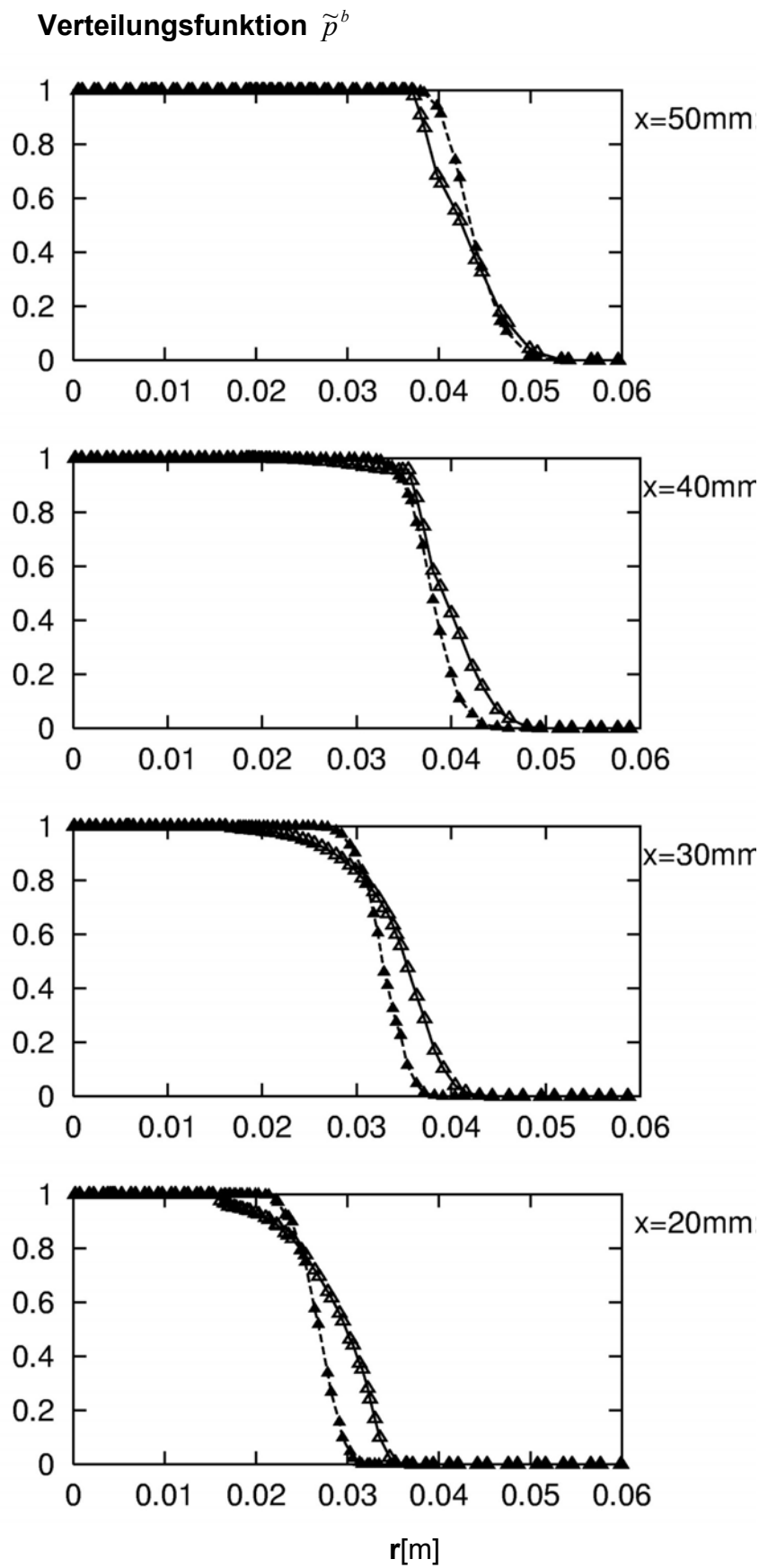
**Abbildung 6.17:** Fall 150Iso: Radiale Profile der tangentialen und radialen Geschwindigkeit.



**Abbildung 6.18:** Fall P150R: Radiale Profile der axialen Geschwindigkeit und der turbulenten kinetischen Energie.



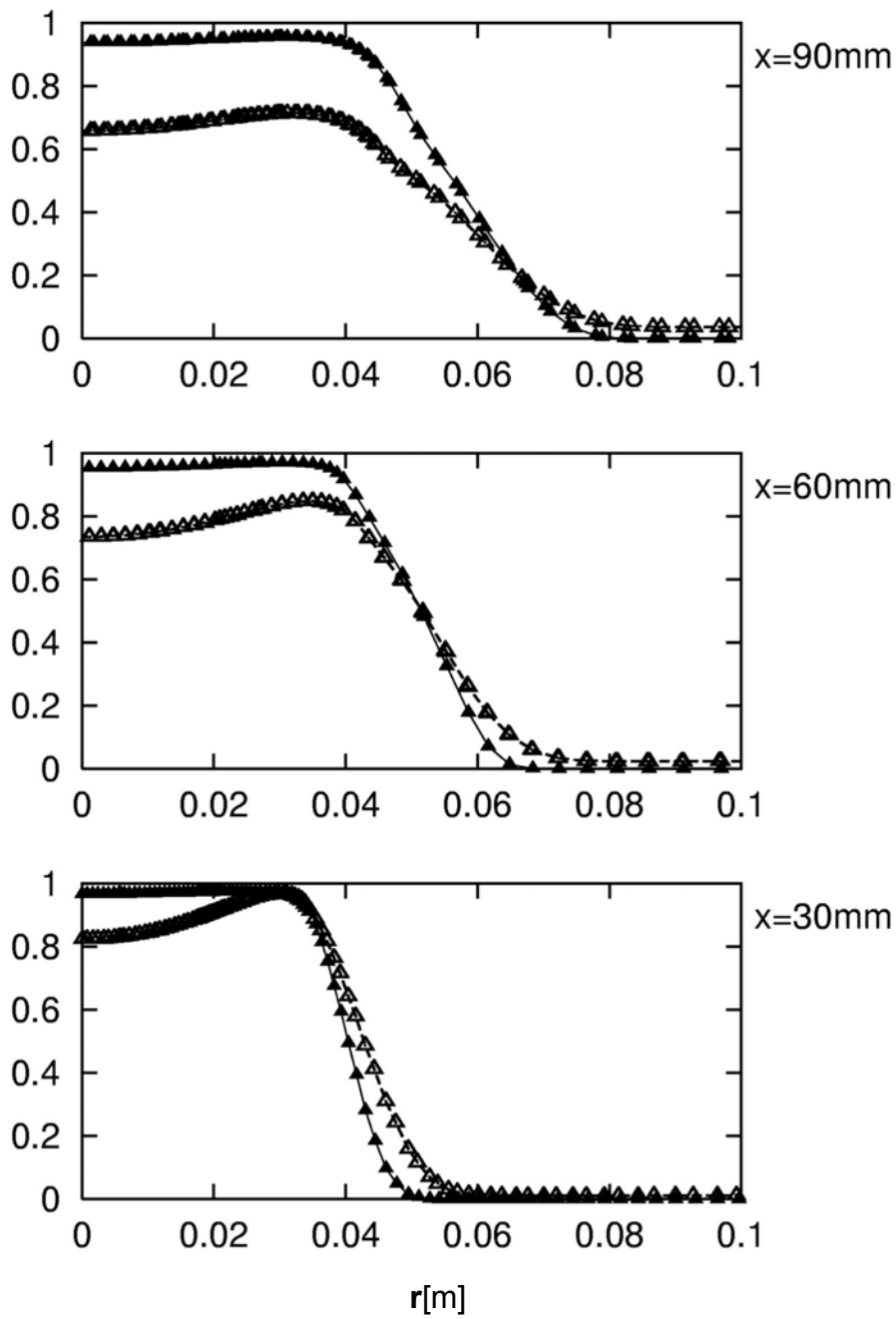
**Abbildung 6.19:** Fall P150R: Radiale Profile der tangentialen und radialen Geschwindigkeit



**Abbildung 6.20:** Vergleich der Verteilungsfunktion der Lage der Flammenfront für  
 ---▲--- - P30R und —▲— P150R.



Normierter Mischungsgrad  $\tilde{f}/\tilde{f}_{\max}$



**Abbildung 6.21:** Vergleich des Mischungsgrades für P30R und P150R:

---▲--- - P30R und —▲— P150R.

Skalarmessungen ist eine Überprüfung der Vorhersagegüte des Mischungsfeldes und somit der von der Mischung abhängigen laminaren Brenngeschwindigkeit z. Zt. noch nicht möglich.

Insgesamt können die oben diskutierten Ergebnisse als zufriedenstellend betrachtet werden. Die Anwendung der Schließungsmodelle zweiter Ordnung oder algebraischer nicht-linearer Ansätze, die bei der Vorhersage verdrahteter Strömungen dem  $k-\varepsilon$  Modell deutlich überlegen sind, könnten die Ergebnisse verbessern.

Die zweite untersuchte Konfiguration entspricht der Leistung von 150kW. Die Ergebnisse der isothermen Rechnungen 150Iso werden zunächst präsentiert.

Ähnlich der 30kW Konfiguration werden die Simulationsergebnisse den Messergebnissen gegenüber gestellt. Das Geschwindigkeitsfeld und die turbulente kinetische Energie werden mit Hilfe der in den Abbildungen 6.16-6.17 dargestellten radialen Profile von Messungen und Rechnungen für die axiale Ebene  $x = 10, 20, 30, 60, 90$  und  $120$  mm verglichen. Eine gute Übereinstimmung zwischen Rechnung und Messung bei den mittleren Geschwindigkeiten ist erkennbar. Die Rückströmgeschwindigkeit und die Länge der Rückströmzone ist auch gut wiedergegeben. Wie bei dem Fall 30Iso wird das Niveau der turbulenten kinetischen Energie wegen der in der kalten Strömung enthaltenen kohärenten Strukturen unterschätzt. Sie konnten nicht mit den hier durchgeführten stationären Berechnungen erfasst werden.

Insbesondere in den unteren Ebenen, in denen die kohärente Struktur die turbulente Strömung mit großen Amplituden überlagert, kann  $\tilde{k}$  von der Simulation nicht wiedergegeben werden. Da, wo durch die Messungen in der Strömung keine kohärente Strukturen nachgewiesen wurde, stimmt das Niveau der turbulenten kinetischen Energie überein. Die isotherme Lösung wurde als Anfangsbedingungen für den reagierenden Fall P150R benutzt.

Die Ergebnisse der reagierenden Strömung sind in den Abbildungen 6.18-6.19 dargestellt. Die Vorhersage der mittleren axialen Geschwindigkeit ist auch in diesem Fall gut gelungen. Die Länge und die Breite der Rezirkulationszone stimmt mit den Messungen überein. Auch der Vergleich der mittleren radialen und tangentialen Geschwindigkeiten zeigt, dass die Simulation sowohl die Lage der Maxima als auch die Werte insgesamt gut wiedergibt. Dabei wird das Maximum der tangentialen und der radialen Geschwindigkeit beim  $x=10\text{mm}$ ,  $x=20\text{mm}$  und  $x=30\text{mm}$  überschätzt. Die turbulente kinetische Energie wird in diesem Fall in dem zentralen Strömungsbereich überschätzt. Der Bereich der zweiten äußeren Scherzone wird jedoch unterschätzt.

Die Abbildung 6.20 stellt den Vergleich der Übergangswahrscheinlichkeit  $\tilde{p}^b$  für den Fall P30R und den Fall P150R dar. Ein Wert von  $\tilde{p}^b=0.5$  markiert dabei die mittlere Position der Flammenfront. Die Breite des Übergangsbereiches ist ein Maß für die turbulente Flammendicke. Der Vergleich zeigt, dass die Flamme im Fall P150R eine breitere räumliche Ausdehnung in radialer Richtung in den Ebenen  $x=20\text{mm}$  und  $x=30\text{mm}$  besitzt, was auf eine in diesem Fall breitere Rückstromzone zurückzuführen ist. In den Ebenen  $x=40\text{mm}$  und  $x=50\text{mm}$  befindet sich die mittlere Position der

Flammenfront an derselben Stelle. Der Übergangsbereich wird in dem Fall P150R deutlich breiter auf allen Ebenen berechnet.

In der Abbildung 6.21 sind die Profile des normierten Mischungsgrades  $\tilde{\xi}/\xi_{\max}$  für die Ebene  $x=30, 60$  und  $90\text{mm}$  präsentiert. Verglichen werden Ergebnisse P30R und P150R. Die Einmischung der Umgebungsluft im Fall P150R ist viel stärker. Daraus folgt, dass bei den viel höher als  $\lambda = 1$  vorliegenden Luftfaktor Stabilitätsprobleme auftreten können.

Insgesamt betrachtet sprechen die Ergebnisse dafür, dass die Anwendung des G-Gleichungsmodells auf die anwendungsnahe Konfiguration erfolgreich war. Jedoch ist es erforderlich die Turbulenzmodelle mit gerechter Betrachtung der Physik anzuwenden.

# 7 Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde ein Gesamtmodell zur Simulation der turbulenten Vormischverbrennung unter der Gasturbinen typischen 3-D Bedingungen entwickelt und untersucht. Der Augenmerk wurde auf die Beschreibung des Post-Flammen-Bereiches gerichtet. Das Modell wurde in RANS-Kontext formuliert. Folgende Teilmodelle wurden dabei kombiniert:

- Die Modellierung der vorgemischten Flammenausbreitung innerhalb turbulenter Umgebungen wurde über das G-Gleichungs-Modell in der durch Peters [89] definierten Form realisiert und für den Fall der Teilvormischverbrennung erweitert. Dabei wurde das G-Gleichungs-Modell mit dem Mischungstransport gekoppelt, um die von der Äquivalenzrate abhängige laminare Flammengeschwindigkeit zu bestimmen, die bei den Flammenausbreitungsprozessen eine wichtige Rolle spielt.
- Die Beschreibung des Transports der Flammenfront wurde über die *level-set*-Methode realisiert. Der Schwerpunkt der Arbeit lag hierbei bei der Implementierung eines Algorithmus für die Reinitialisierung des G-Feldes zur Erhaltung der Abstandsfunktion  $|\nabla \tilde{G}| = 1$  in den CFD-Code mit komplexer Geometrie. Die Erhaltung der Abstandsfunktion hat eine entscheidende Bedeutung für die Genauigkeit und die numerische Stabilität des Gesamtverfahrens. Im Hinblick auf diesen Umstand wurde der Algorithmus von Russo & Smereka [105] implementiert.
- Die Speziesverteilung im Post-Flammen-Bereich wurde durch Kopplung des G-Gleichungs-Modell sowohl mit Gleichgewichtschemie als auch durch die Konditionierung der Reaktionsfortschrittsvariablen (ILDM-Chemiemechanismus) auf die Flammenfront untersucht, wobei auch kinetische Effekte berücksichtigt werden können. Die Turbulenz-Chemie Interaktion wurde mit Hilfe der Methode angenommener Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion beschrieben.

- Der Einfluss gekühlter Wände auf Temperatur- und Speziesverteilung in den Brennkammern können durch das Strahlungsmodell berücksichtigt werden. Das in dieser Arbeit implementierte  $SP_N$ -Modell [128] beinhaltet wellenlänge- und gasmischungsabhängige Absorptionskoeffizienten. Wird die Strahlung durch Rußpartikel beeinflusst, kann das durch zusätzliche Absorptionskoeffizienten, die aus dem integrierten Rußmodell [68] folgen, berücksichtigt werden.

Das vorgestellte Gesamtmodell wurde in einen komplexen dreidimensionalen CFD-Code mit flexibler Geometrie integriert und anhand von zwei Konfigurationen getestet.

- Alle in dieser Arbeit vorgestellten Vormischflammen wurden als teilvorgemischt betrachtet, da ein Einfluss der Umgebungsluft auf das Äquivalenzverhältnis im Experiment beobachtet wurde. Die Ergebnisse der Simulation einer pilotierten Vormischflamme zeigen die Notwendigkeit der Anwendung der Konditionierung der Reaktionsfortschrittsvariablen auf die Flammenfront. Die Kopplung zwischen dem G-Gleichungs-Modell und ILDM-Modell bringt Vorteile bei der Bestimmung der Flammenlänge, Temperatur- und Speziesverteilung.
- Bei der Simulation verdrallter Vormischflamme hat sich das G-Gleichungs-Modell trotz der wesentlich komplexeren Strömung als erfolgreich bewiesen. Das mittlere Strömungsfeld wurde insgesamt sehr gut vorhergesagt. Die Vorhersage des Niveau der turbulenten kinetischen Energie in der Strömung konnte nicht mit der hier durchgeführten stationären Berechnungen besser werden. Eine instationäre Berechnung sowie die Verwendung der höheren Turbulenzmodelle könnte dies verbessern. Die Reinitialisierung ist numerisch sehr aufwändig und hat einen großen Rechenzeitbedarf. Je nach Komplexität des Problems liegt der Mehraufwand um Faktor 2 bis 20 höher als die Rechnung ohne Reinitialisierung. Die Anwendung des *Extension-Velocity* Ansatzes könnte die Anzahl der Reinitialisierungen minimieren und damit den Rechenzeitbedarf drastisch verringern.
- Die in dieser Arbeit untersuchten verdrallten Vormischflammen stellen eine offene Konfiguration mit der Luftzahl von 1 bis 1.2 dar, wobei Strahlungseffekte und Ruß vernachlässigt werden können. Eine Anwendung des in der Abbildung 4.1 dargestellten Gesamtmodells im *post-flame*-Bereich der Vormischflammen kann ohne Änderungen des Programms vorgenommen werden.

- Die Validierung des Strahlungsmodells anhand einer eingeschlossenen Wasserstoff-Luft-Diffusionsflamme zeigt zufriedenstellende Ergebnisse bei der Vorhersage der Temperatur. Untersuchungen an den Kohlwasserstoffflammen sind notwendig, um den Einfluss der Rußpartikel auf die Strahlung zu berücksichtigen.

## 8 Literaturverzeichnis

- [1] Abraham J., Williams F.A. Bracco F.V.: A Discussion of Turbulent Flame Structure in Premixed Charges. *SAE-Paper 850345*.
- [2] Adalsteinsson D. und Sethian J.A. A Fast Level Set Method for Propagating Interfaces. *Journal of Computational Physics*, 118:269-277, 1995.
- [3] Adalsteinsson D. und Sethian J.A. The Fast Construction of Extension Velocities in Level Set Methods. *Journal of Computational Physics*, 148:2-22, 1999.
- [4] Barths H., Peters N., Brehm N., Pfitzner M. und Smiljanovski V. Simulation of Pollutant Formation in a Gas-Turbine Combustor Using Unsteady Flamelets. *Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion*, Seiten 1841-1847. The Combustion Institute, 1998.
- [5] Bauer H.J., Krebs W., Kellerer H., Heilos A., Leuckel W., Wittig S. : Strahlungswärmeübergang und Rußbildung in Brennräumen. *Proceedings des 10. TECFLAM Seminars*, Karlsruhe.
- [6] Borghi R.: On the Structure and Morphology of Turbulent Premixed Flames. In Casci C., Herausgeber, Recent Advances in the Aerospace Sciences, Seiten 117-138. Plenum Publishing Corporation, 1985.
- [7] Boris J. New Directions in Computational Fluid Dynamics. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 21:345-385, 1989.
- [8] Bradley D., Gaskell P.H. und Gu X.J.: Burning Velocities, Markstein Lengths and Flame Quenching for Spherical Methan-Air Flames: A Computational Study. *Combustion and Flame*, 104:176-198, 1996.
- [9] Brantley P.S., Larsen E.: The Simplified  $P_3$  Approximation. *Nucl. Sci. Eng.*, 134:1,2000
- [10] Bray K.N.C., Libby P.A., Masuya G. und Moss J.B. Turbulence Production in Premixed Turbulent Flames. *Combustion Science and Technology*, 25:127-140, 1981.
- [11] Bray K.N.C., Libby P.A. und Moss J.B.: Unified Modeling Approach for Premixed Turbulent Combustion Part I: General Formulation. *Combustion and Flame*, 61:87-102, 1985.

- [12] Bray K.N.C. and Peters N.: Laminar Flamelets in Turbulent Flames. In Libby P.A. und Williams F.A., Herausgeber, *Turbulent Reacting Flows*, Seiten 63-113. Academic Press London, 1993
- [13] Bressloff N.W., Moss J.B., Rubini P.A.: CFD Prediction of Coupled Radiation Heat Transfer and Soot Production in Turbulent Flames. In Twenty Sixth Symposium (International) on Combustion. Seiten 2379-2386, 1996.
- [14] Brookes S.J. and Moss J.B. Predictions of Soot and Thermal Radiation Properties in Confined Turbulent Jet Diffusion Flames, *Combustion and Flame* 116:486- 503,1999.
- [15] Burke S.P. and Schumann: In *Ing. Eng. Chem.*, 20:998, 1928.
- [16] Carlson K.D. and Lathrop B.G.,: *Transport Theory –the Method of Descrete Ordinates in Computing Methods in Reactor Physics*, H. Greenspan, C.N. Kelber and D. Okrent (Eds.), Gordon and Breach Science Publishers,1968.
- [17] Case K.M. and Zweifel P.: *Linear Transport Theory*. Addison Wesley, Mass.,1967.
- [18] Chandrasekhar S. *Radiative Transfer*, Dover 1960.
- [19] Chen Y.C., Peters N., Schneemann G.A., Wruck N., Renz U. und Mansour M.S. The Detailed Flame Structure of Highly Turbulent Premixed Methan-Air Flames. *Combustion and Flame*, 107:223-244, 1996
- [20]Correa C.: *Combustion Simulations in Diesel Engines using Reduced Reaction Mechanisms*, Dissertation, Heidelberg, 2000
- [21] Correa S.M. Power Generation and Aeropropulsion Gas Turbines: from Combustion Science to Combustion Technology. In *Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion*, Seiten 1793-1807. The Combustion Institute, 1998.
- [22] Crosbie A.L., Schrenker R.G.: Exact Expressions of Radiative Transfer in Three Dimensional rectangular Geometry. *Journal of Quantitative Spectroscopy Radiative Transfer*, Vol. 28, Seiten. 507-526, 1982.
- [23] Damköhler G. Der Einfluss der Turbulenz auf die Flammengeschwindigkeit in Gasgemischen. *Z.Elektrochem.*, 46:601-652,1940. Englische Übersetzung aus *NASA Tech. Mem.* 1112, 1947.
- [24] Duklos J.M, Veynante D., Poinso T. A Comparison of Flamelet Models for Premixed Tubulent Combustion. *Combustion and Flame*, 118:101-108, 1999.
- [25] Düsing M. Large-Eddy Simulation turbulenter Vormischflammen. Dissertation, Technische Universität Darmstadt, 2004.
- [26] Echekki T. und Chen J.H. Analysis of the Contribution of Curvature to Premixed Flame Propagation. *Combustion und Flame*, 118:308-311,1999



- [27] Ferziger J.H. und Peric M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag Berlin-Heidelber, 1996
- [28] Ferrao P. Heitor M.V.: *Turbulent Mixing and Non-Gradient Diffusion in Baffle stabilized Flames*. In *Turbulent Shear Flow 9*, Eds. Durst F. et. al., Springer Verlag, Seiten 427-438, 1995.
- [29] Gelbard E.M. Simplified spherical harmonics equations and their use in shielding problems. *WAPD-T-1182, Bettis Atomic Power Laboratory*, 1961.
- [30] Germano M., Piomelli U., Moin P., Cabot W.H.: A Dynamic Subgrid-Scale Eddy Viscosity Model. *Physics of Fluids A*, 3:1760-1765, 1991.
- [31] Göttgens J., Mauss F. und Peters N. Analytic Approximations of Burning Velocities and Flame Thickness of Lean Hydrogen, Methan, Ethylene, Ethane, Acetylene and Propan Flames. In *Twenty Symposium (International) on Combustion*, Seiten 129-135. The Combustion Institute, 1992.
- [32] Goldin G.M. Menon S.: A Comparison of Scalr PDF Turbulent Combustion Models *Combustion and Flame*, 113:442-453, 1998.
- [33] Gu X.J., Haq M.Z., Lawes M. und Wooley R. Laminar Burning Velocity and Markstein Length of Methan-Air Mixtures. *Combustion and Flame*, 121:41-58, 2000.
- [34] Gutheil E., Bockhorn H. The Effect of Multi Dimensional PDF's on the Turbulent Reaction Rate in Turbulent Reacting Flows at Moderate Damköhler Numbers. *Physico-Chemical Hydrodynamics*, 9(3/4):525-535, 1987.
- [35] Farmer J.T., Howell J.R.: Monte Carlo Prediction of Radiative Heat Transfer in Inhomogenous, Anisotropic, Nongray Media. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 8, Seiten 133-139, 1994.
- [36] Hartick J. *Zur Wechselwirkung von Strahlung und Turbulenz in Dissfusionsflammen*. Dissertation, Technische Universität Darmstadt, 1996.
- [37] Hinz A. *Numerische Simulation turbulenter Methan-Diffusionsflammen mittels Monte Carlo PDF Methoden*. Dissertation, Technische Universität Darmstadt, 2000.
- [38] Hirt C. and Niccholls B.: Volume of Fluid Method for the Dynamics of Free Boundaries. *J. Comp. Phys.*, 39:201-225, 1981.
- [39] Hottel H.C, Sarofim A.F. *Radiative Transfer*, McGraw-Hill, 1967.
- [40] Janicka J. *Modellierung der Momentengleichungen Zweiter Ordnung für Flammen*. Habilitationsschrift, 1984.
- [41] Janicka J. und Kollmann W. A Two-Variables Formalism for the Treatment of Chemical Reaction in Turbiulent H<sub>2</sub>-Air Diffusion Flames. In *Seventeenth Symposium (International) on Combustion*, Seiten 421-430. The Combustion

Institute, 1978.

- [42] Janicka J. und Peters N. Prediction of Turbulent Jet Diffusion Flame Lift-Off using a PDF Transport Equation. In *Nineteenth Symposium (International) on Combustion*,
- [43] Johmann P. Sinigersky A., Hehle M., Schäfer O., Koch R.: Numerical Simulation of a Precessing Vortex Breakdown. Submitted 2004.
- [44] Jones W.P.: In Libby P.A. and Williams F.A. *Turbulent Reacting Flows*. Seiten 309-374. Academic Press, London, San Diego, New York, 1994.
- [45] Jones W.P. Models for Turbulent Flows with Variable Density and Combustion. In *Prediction Methods for Turbulent Flows*, Band 1979-02. Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1979.
- [46] Jones W.P und Launder B.E. The Prediction of Laminarization with a Two-Equation Model of Turbulence. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15:301-314, 1972.
- [47] Jones W.P und Musonge P. Closure of the Reynolds Stress and Scalar Flux Equations. *Phys. Fluids*, 31(12):3589-3604, 1988.
- [48] Keck R.: *Reinitialization for Level Set Method*. Master Thesis, Laboratory of Technomathematics, University of Kaiserslautern, 1998.
- [49] Kerstein A.R. Linear-Eddy Modeling of Turbulent Transport. Part 7. Finite Rate Chemistry and Multi-Stream Mixing. *Journal of Fluid Mechanics*, 240:289-313, 1992.
- [50] Kerstein A.R., Ashurst T. und Williams F.A. Field Equation for Interface Propagation in Unsteady Homogeneous Flow Field. *Physical Review A*, 37(7):2728-2731, 1988.
- [51] Klein M. Direkte Numerische Simulation des primären Strahlzerfalls in Einstoffzerstäuberdüsen. Dissertation, Technische Universität Darmstadt, 2003.
- [52] Koch R. *Berechnung des mehrdimensionalen Strahlungsaustauschs in Gasturbinen-Brennkammern: Entwicklung und Überprüfung von Grundlagenorientierten Ansätzen und Methoden*. Dissertation, Universität Karlsruhe, 1992.
- [53] Kolmogorov A.N. The Local Structure of Turbulence in Incompressible Viscous Fluids for Very Large Reynolds Numbers. *C.R. Aca. Sci. USSR*, 30:301-305, 1941.
- [54] Krebs W. *Mehrdimensionaler Strahlungswärmeübergang an Gasturbinen-Brennkammerwände: Entwicklung und Überprüfung von Berechnungsverfahren*. Dissertation, Universität Karlsruhe, 1995.
- [55] Krebs W. Koch R. Jeckel R., Ganz B., Wittig S. *Messung des spektralen Strahlungswärmeübergangs in einer Modellbrennkammer: Einfluss von*

- Brennstoffart, Luftverhältnis und Turbulenz*, Proceedings des 9. Tecflam Seminars, Stuttgart 1993.
- [56] Krieger G.C.: *Untersuchung zur Hydroxylradikal- und Stickoxidbildung in turbulenten Wasserstoffdiffusionsflammen mittels Wahrscheinlichkeitsdichtemethoden*. Dissertation, Technische Universität Darmstadt, 1997.
- [57] Kronenburg A., Bilger R.W. Kent J.H: Modeling Soot Formation in Turbulent Methan-Air Jet Diffusion Flames. *Combustion and Flame* 121:24-40, 2000.
- [58] Lafaurie B., Nardonne C., Scardovelli R., Zaleski S. und Zanetti G. Modelling Merging and Fragmentation in Multiphase Flows with Surfer. *J. Comp. Phys.*, 113:134-147, 1994.
- [59] Landenfeld T. *Numerische Beschreibung turbulenter Methandiffusionsflammen mit Schließungsmodellen zweiter Ordnung und angenommenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion*. Dissertation, Technische Universität Darmstadt, 1999.
- [60] Landenfeld T., Sadiki A., Janicka J.: A Turbulence-Chemistry Interaction Model Based on a Multivariate Presumed beta-PDF Method for Turbulent Flames. *Flow, Turb and Comb.* 68,pp111-135, 2002.
- [61] Larsen E., Pomraning G., Badham V.C. Asymptotic Analysis of Radiative Heat Transfer Problems. *J. Quant. Spectr. And Radiative Transfer*, 29:285-310,1983.
- [62] Launder B.E. and Samaraweera S.: Application of a Second Moment Turbulent Closure to Heat and Mass Transport in Thin Shear Flows. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 26:537-556, 1975.
- [63] Launder B.E. and Spalding D.B. *Mathematical Models of Turbulence*. Acad. Press, London, NY, 1972.
- [64] Launder B.E. and Spalding D.B.: The numerical computation of turbulent flows. *Comput. Methods Appl.Mech. Eng.* Vol.3, pp. 269-289,1974
- [65] Law C.K. A Compilation of Experimental Data on Laminar Burning Velocities. In Peters N und Rogg B., Herausgeber, *Reduced Kinetic Mechanisms for Application in Combustion Systems*, Band M 15 von Lecture Notes in Physics, Seiten 15-26. Springer-Verlag Berlin-Heidelberg, 1993.
- [66] Leister H.J.und Peric M.: Vectorized Strongly Implicit Solving Procedure for Seven-Diagonal Coefficient Matrix. *Int. J. Numer. Meth. Heat Fluid Flow*, Vol.4, Seiten 159-172, 1994.
- [67] Libby P.A. und Williams F.A., Herausgeber. *Turbulent Reacting Flows*. Academic Press,1994.
- [68] Lindstedt P.R. In *Soot Formation in Combustion*. (H. Bockhorn,Ed.) Springer Verlag, Heidelberg, 1994, s. 417.

- [69] Maas U. und Pope S.B. Implementation of Simplified Chemical Kinetic Based on Intrinsic Low-Dimensional Manifolds. In *Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion*, Seiten 103-112. The Combustion Institute, 1992a.
- [70] Maas U. und Pope S.B. Simplifying Chemical Kinetics: Intrinsic Low Dimensional Manifolds in Composition Space. *Combustion and Flame*, 88:239-264, 1992b.
- [71] Magnussen B.F. und Hjertager B.H.: On Mathematical Models of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion. *Sixteenth Symposium (International) on Combustion*. Seiten 719-729. The Combustion Institute, 1977.
- [72] Maltsev A. *Towards the Development and Assessment of Complete CFD Models for the Simulation of Stationary Gas Turbine Combustion Process*. Dissertation, Technische Universität Darmstadt, 2003.
- [73] Maltsev A., Sadiki A., Janicka J.: Coupling of Extended BML Model and Advanced Turbulence and Mixing Models in Predicting Partially Premixed Flames. *Third International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena*, 501-506, Sendai, Japan, 2003.
- [74] Marble F.E. Broadwell J.E.: The Coherent Flame Model for Turbulent Chemical Reaction. Purdue University, Project SQUID Technical Report TRW-9-PU, Purdue, USA, 1977
- [75] Markstein G. *Nonsteady Flame Propagation*. Pergamon Press, Oxford, Großbritannien, 1964.
- [76] Massias A., Diamanis D., Mastorakos E. und Goussis D.A. An Algorithm for the Construction of Global Reduced Mechanisms with CSP Data. *Combustion and Flame*, 117(4):685-708, 1999.
- [77] Matalon M., Matkovsky B.J. Flames as Gasdynamic Discontinuities. *Journal of Fluid Mechanics*, 124:239-259, 1982.
- [78] Mengler C. *Grobstruktursimulation der Strömungs- und Mischungsfelder komplexer, anwendungsnaher Konfigurationen*. Dissertation, EKT, TU Darmstadt, 2002.
- [79] Mie G.: Beiträge zur Optik trüber Medien speziell kolloidaler Metalllösungen. *Annalen der Physik*, Vol. 25, Seiten 377-445, 1908.
- [80] Modest M.F., *Radiative Heat Transfer*. McGraw-Hill, 1993.
- [81] Moss J.B., Stewart C.D. and Syed K.J. Flowfield Modeling of Soot Formation at Elevated Pressure. In *Twenty Second Symposium (International) on Combustion Institute*, Seiten 413-423, 1988.
- [82] Noh W. und Woodward P. SLIC (Simple Line Interface Calculation). In der Vooren V. und Zandbergen P., Herausgeber, *Proceedings of the 5th Int.*

- Conference on Num. Methods in Fluid Dynamics*. Seiten 330-340. Springer, 1976.
- [83] Oberlack M.: *Symmetrie, Invarianz und Selbstähnlichkeit in der Turbulenz*. Habilitation, RWTH Aachen, 2000.
- [84] Oberlack M., Wenzel H., Peters N. On Symmetries, Invariant Solutions and Averaging of the G-equation in Premixed Combustion. *Combustion Theory Modeling*, 5:363-383, 2001.
- [85] Osher S., Fedkiw R.: *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*. Springer-Verlag, New York, Berlin, Heidelberg, 2003.
- [86] Ou S.C. und Liou K.-N.: Generalisation of the Spherical Harmonics Method to Radiative Transfer in Multidimensional Space. *J. Quant. Spectr. Radiat. Transfer*. Vol. 28, Seiten 271-288, 1982.
- [87] Patel S.N.D.H., Ibrahim, S.S. Burning Velocities of Propagation Turbulent Premixed Flames. First International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, 501-506, Santa-Barbara, USA, 1999.
- [88] Pelce P, Clavin P. Influence of Hydrodynamics and Diffusion upon the Stability Limits of Premixed Flames. *Journal of Fluid Mechanics*, 124:219-237, 1982.
- [89] Peters N. *Turbulent Combustion*. Cambridge University Press, 2000.
- [90] Peters N. Laminar Diffusion Flamelet Model in Non-Premixed Turbulent Combustion. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 10:319-339, 1984.
- [91] Peters N. Laminar Flamelet Concepts in Turbulent Combustion. In *Twenty-First Symposium (International) on Combustion*, Seiten 1231-1250. The Combustion Institute, 1986.
- [92] Peters N. Length Scales in Laminar and Turbulent Flames. In Oran E. und Boris J., Herausgeber, *Numerical Approaches in Combustion Modelling*. Band 135, Seiten 155-182. AIAA, 1991.
- [93] Peters N. The turbulent Burning Velocity for Large Scale and Small Scale Turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 384:107-132, 1999.
- [94] Phillips H.: Flame in a Bouyant Methan Layer. In *Tenth Symposium (International) on Combustion*, Seiten 1057-1064. The Combustion Institute, 1965.
- [95] Pitsch H. Duchamp de Lageneste L. Large-Eddy Simulations of Premixed Turbulent Combustion Using a Level-Set Approach. In *Proc Comb. Inst*, 29, 2001-2008, 2002.
- [96] Poinot T. and Veynante D.: *Theoretical and numerical Combustion*. R.T. Edwards, Inc, 2001.

- [97] Pope S. PDF Methods for Turbulent Reactive Flows. *Physics of Fluids*, 26:404-408, 1985
- [98] Pope S. Turbulent Premixed Flames. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 19:237-270, 1987.
- [99] Pope S. *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, Cambridge Großbritannien, 2000.
- [100] Popinet S. Zaleski S.: A Front Tracking Algorithm for the Accurate Presentation of Surface Tension. *Int. J. for Num. Meth. In Fluids*, 1999.
- [101] Prandtl L. Über ausgebildete Turbulenz. *ZAMM* 25,136-139, 1925.
- [102] Prandtl L. Über ein neues Formelsystem für die ausgebildete Turbulenz. *Nachr. Akad. Wiss. Göttingen, Math.-Phys. Kl.*, 6-19, 1945.
- [103] Repp S., Sadiki A., Khvissiouk E., Janicka J: Modelling and simulation of a turbulent premixed methan/air flame based on the G-equation. *Proceedings of ASME Turbo Expo 2002*. Amsterdam, The Netherlands.
- [104] Repp S.: *Numerische Simulation turbulenter, vorgemischter Verbrennung mittels der Level-Set-Methode*, Dissertation, Technische Universität Darmstadt, 2001.
- [105] Russo G., Smereka P., A Remark on Computing Distance Function. *Phys. Fluids*, 12(1), 2000.
- [106] Rhie C.M. and Chou W.L. A Numerical Study of the Turbulent Flow Past an Isolated Airfoil with Trailing Edge Separation. *AIAA-82-0998*, 1982.
- [107] Said R., Garo A., Borghi R., Soot Formation Modeling for Turbulent Flames *Combustion and Flame*,108:71-86,1997.
- [108] Schäfer M. *Numerik im Maschinenbau*. Springer-Verlag Berlin-Heidelberg, 1999.
- [109] Schäfer T., Bockhorn H.: Untersuchungen zum Teilchenwachstum von Rußteilchen in vorgemischten Kohlwasserstoff-Sauerstoff-Flammen. *Proceedings des 7. Tecflam Seminars*, Karlsruhe.
- [110] Schmidt D., Segatz J., Riedel U. und Warnatz J. Simulation of Laminar Methan-Air Flames using Automatically Simplified Chemical Kinetics. *Combustion, Science and Technology*, 113-114:3-16, 1996.
- [111] Schneider C. *Über die Charakterisierung von Turbulenzstrukturen in verdrahten Strömungen*, Dissertation, Technische Universität Darmstadt, 2003.
- [112] Seaid M. *Mathematical Models and Numerical Methods for Radiation Hydrodynamics: Relaxations Schemes and Multilevel Algorithms*. Dissertation, Technische Universität Darmstadt, 2004.

- [113] Sethian J.A. Fast Marching Level Set Method for Monotonically Advancing Fronts. In *Proceedings of the National Academy of Science*, Band 93, Seiten 1591-1595. 1996.
- [114] Sethian J.A. Fast Marching Methods. *SIAM Review*, 41(2): 199-235, 1999a
- [115] Sethian J.A. *Level Set Methods and Fast Marching Methods*. Cambridge University Press, 1999b.
- [116] Shir C.C. A preliminary Study of Atmospheric Turbulent Flows in the Idealized Planetary Boundary Layer. *J.Atmos. Sci.*, 30:Seiten 1327-1339, 1973.
- [117] Siddall R.G., Selcuk N.: Evaluation of a New Six-Flux Model for Radiative Transfer in Rectangular Enclosures. *Trans. Inst. Chem. Eng.*, Vol. 57, Seiten. 327-359, 1979
- [118] Siegel R., Howell J.R., Lohrengel J. *Wärmeübertragung durch Strahlung*. Teil 1, Springer-Verlag, 1988.
- [119] Smagorinsky J.M., *General Circulation Experiments with the Primitive Equations, 1. The basic Experiment*, *Monthly Weather Rev.*, 91(1963),Seiten 99-164.
- [120] *Soot Formation in Combustion: Mechanisms and Models*, Springer 1994
- [121] Spalding D.B. Mixing and Chemical reaction on Steady Confined Turbulent Flames. In *Thirteenth Symposium (International) on Combustion*. Seiten 649-657. The Combustion Institute, 1970.
- [122] Steward F.R. and Cannon P., *Int J. Heat Mass Transfer* ,14-245, 1971.
- [123] Stone H.L.: Iterative Solution of Implicit Approxiamtions of Multidimensional Partial Differential Equations. *SIAM J. Numer. Anal.* Vol.5, No.3, pp. 530-558, 1968.
- [124] Sussman, M., Fatemi E. An Efficient, Interface Preserving Level Set Redistancing Algorithm and its Application to Interfacial Incompressible Fluid Flow. *SIAM J.Sci. Comput.*, 20(4):1165-1191, 1999.
- [125] Sussman, M., Smereka, P., Osher, S. A level set approach for Computing Solutions to incompressible Two-Phase Flow. *J. Comp. Phys.*, 114, 1994.
- [126] Syed K.J., Stewart C.D, Moss J.B.: Modelling Soot Formation and Thermal Radiation in Bouyant Turbulent Diffusion Flames. In *Twenty-Third Symposium (International) on Combustion*. Seiten 1533-1541, 1990.
- [127] Thömmes G., Seaid M., Götz T., Klar A., Larsen E.W.: Simplified  $P_N$  Approximations to the Equations of Radiative Heat Transfere in Glass, *Journal of Computational Physics*, 2001.

- [128] Thömmes G. *Radiative Heat Transfer for Glass Cooling Problems: Analysis and Numerics*. Dissertation, Technische Universität Darmstadt, 2002.
- [129] Tryggvason G., Bunner B., Esmaeeli A., Juric D., Al-Rawahi N., Tauber W., Han J., Nas S. und Jan Y.: A Front Tracking Method for Computations of Multiphase Flow. *J. Comp. Phys.*, 153:26-50., 1999.
- [130] Vervisch P. Domingo, Haugel R.: Turbulent Combustion in the light of Direct and Large Eddy Simulations. *Turbulence and Shear Flow Phenomena*, Sendai, Japan, 25-27 Juni 2003.
- [131] Warnatz J., Maas U. and Dibble R.W.: *Combustion*, Springer Verlag, 1996
- [132] Warnatz J., Resolution of Gas Phase and Surface Combustion chemistry into Elementary Reactions. In *Twenty forth Symposium (International) on Combustion*. Seiten 553-579. The Combustion Institute, 1984.
- [133] Williams F.A. *The Mathematics of Combustion*, Kapitel Turbulent Combustion, Seiten 97-131. SIAM, 1985.
- [134] Willcox D.C.: *Turbulence Modeling for CFD*. DCW Industries, La Canada, California, 1993.
- [135] Wirth M. Die turbulente Flammenausbreitung im Ottomotor und ihre charakteristischen Längenskalen. Dissertation, Technische Hochschule Aachen, 1993.
- [136] Yamaoka I. und Tsuji H. Determination of burning Velocity using Counterflow Flames. In *Twentieth Symposium (International) on Combustion*, Seiten 1883-1892. The Combustion Institute, 1984.
- [137] Yuen W.W., Tien C.L.: *Sixteenth Symposium (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute. Seite 1481. 1976.
- [138] Zimont V.L. Biagioli F. and Syed K.: Modeling Turbulent Premixed Combustion in the intermediate Steady Propagation Regime. *Progress in Computational Fluid Dynamics*, Vol.1, Nos. 1/2/3, Seten 14-28, 2001.



## Lebenslauf

**Name:** Elena Schneider (geb. Khvissiouk)  
**Geburtsdatum:** 11.07.1975  
**Geburtsort:** Wladiwostok (Russland)  
**Familienstand:** verheiratet, ein Kind

### Schulbildung

09/1982 – 06/1992 Grundschule und Gymnasium, Schule Nr. 1, Alexandrov  
(Russland)  
Abschluss: Abitur

### Studium

09/1993 – 02/1999 Studium bei der Moskauer Staatlichen Luftfahrt-Hochschule  
(Technische Universität),  
Fakultät: Triebwerke und energetische Anlagen  
Fachgebiet: Flugzeugmotoren und energetische Anlagen  
Abschluss: Dipl.-Ing.

09/1998 – 02/1999 Diplomarbeit am Fachgebiet Flugzeugmotoren und energetische  
Anlagen.

09/1999 – 05/2000 Aspirantin bei der Moskauer Staatlichen Luftfahrt-Hochschule  
Fachgebiet Flugzeugmotoren und energetische Anlagen.

06/2000 – 05/2005 Promotionsstudentin am Fachgebiet Energie- und  
Kraftwerkstechnik, TU-Darmstadt,  
Anfertigung einer Dissertation zum Thema:  
Numerische Simulation turbulenter vorgemischter  
Verbrennungssysteme: Entwicklung und Anwendung eines  
RANS- basierten Gesamtmodells“.

### Berufliche Tätigkeit

06/2000 – 05/2005 Wissenschaftliche Mitarbeiterin am Fachgebiet Energie- und  
Kraftwerkstechnik, TU-Darmstadt